

国际信息工程先进技术译丛

CRC Press
Taylor & Francis Group

光通信系统中的光子学建模与设计

Photonics Modelling and Design

[波兰] 斯瓦沃米尔·苏耶茨基(Sławomir Sujecki) 著

武冀 译



Photonics Modelling and Design

Sławomir Sujecki

◎通过MATLAB 代码、思路提示等形式，介绍了对光子器件进行建模和设计的方法

◎分析光在电介质中传播及热扩散和载流子输运；开发光纤和半导体激光器模型；推导光纤中光短脉冲的传播；以实际或开发中的器件为实例，将所有模型用于实践



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

国际信息工程先进技术译丛

光通信系统中的光子学建模与设计

Photonics Modelling and Design

[波兰] 斯瓦沃米尔·苏耶茨基（Sławomir Sujecki） 著
武 冀 译



机 械 工 业 出 版 社

本书着重介绍如何使用工程或应用物理学，对光子器件进行建模和设计。内容涵盖了绝缘介质中的光传播分析、热扩散和载流子输运以及光纤和半导体激光器的建模，并讨论了光纤中的光短脉冲传播。本书基础教学和研究并重，其内容既适合本科学生和研究生，也对博士生和关注光子器件建模和设计的研究者有诸多益处。

Photonics Modelling and Design/by Sławomir Sujecki/ISBN：9781466561267

北京市版权局著作权合同登记　图字：01-2015-3494 号。

图书在版编目（CIP）数据

光通信系统中的光子学建模与设计/（波）苏耶茨基著；武冀译．—北京：机械工业出版社，2016.5

（国际信息工程先进技术译丛）

书名原文：Photonics Modelling and Design

ISBN 978-7-111-53220-0

Ⅰ．①光…　Ⅱ．①苏…②武…　Ⅲ．①光通信系统－研究

Ⅳ．①TN929.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2016）第 051741 号

机械工业出版社（北京市百万庄大街 22 号　邮政编码 100037）

策划编辑：吕　潇　责任编辑：吕　潇

责任校对：肖　琳　封面设计：马精明

责任印制：常天培

北京京丰印刷厂印刷

2016 年 5 月第 1 版第 1 次印刷

169mm×239mm·20 印张·412 千字

0 001—2 500 册

标准书号：ISBN 978-7-111-53220-0

定价：99.00 元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

电话服务	网络服务
服务咨询热线：010-88361066	机 工 官 网：www.cmpbook.com
读者购书热线：010-68326294	机 工 官 博：weibo.com/cmp1952
010-88379203	金　书　网：www.golden-book.com
封面无防伪标均为盗版	教育服务网：www.cmpedu.com

原书前言

本书着重介绍如何使用工程或应用物理学，对光子器件进行建模和设计。本书基础教学和研究并重，其内容既适合本科学生和研究生，也对博士生和关注光子器件建模和设计的研究者有诸多益处。

作者试图避免使用深奥的数学和量子力学语言，以使更多的读者可以明了本书的内容。不仅如此，本书还包含了众多实践性内容，它们基于一系列相对简单的实例，并通过 MATLAB 环境进行软件仿真。

本书由如下几个方面构成：第 1 章为引论；第 2~4 章为绝缘介质中的光传播分析；第 5、6 章会针对热扩散和载流子输运进行讨论；在第 7、8 章中，我们根据第 2~6 章研究的理论，对光纤和半导体激光器进行建模。最后，在第 9 章中，我们会对光纤中的光短脉冲传播进行讨论。

很大程度上，本书是自成体系的。不过，倘若对光子学有一般程度的认知，对光纤以及半导体激光器工作原理有足够的了解，那么这些背景知识可以帮助读者更好地理解本书内容。在涉及基础问题的相关章节，我们在引论部分推荐了部分文献，以帮助读者进行预习。

EU 项目给予了本书极大的帮助，在此特别鸣谢：Ultrabright、Bright. EU、Brighter. EU、FastAccess、Copernicus 和 MINERVA。同时鸣谢 NUSOD 和 ICTON 会议对本书的巨大贡献。我特别感谢 J. Piprek 博士（NUSOD 学会）和 M. Marciniak 教授（国家通信研究院，波兰华沙），他们分别为 NUSOD 和 ICTON 学会的发起人和组织者。我同时感谢在 EU 项目中一起工作过的研究者们，他们是西班牙马德里理工大学的 I. Esquivias 教授和 L. Borruel 博士；德国费迪南博朗高频技术研究所的 B. Sumpf 博士，H. Wenzel 博士和 G. Erbert 博士；法国 Thales 集团，Ⅲ－Ⅴ实验室的 N. Michel 博士和 M. Krakowski 博士；瑞典查尔姆斯理工大学的 A. Larsson 教授；芬兰 Modulight 集团的 P. Uusimaa 博士；法国光学研究院查理法布希实验室的 N. Dubreuil 博士和 G. Pauliat 博士；芬兰坦佩雷理工大学的 M. Dumitrescu 博士和 M. Pessa 教授；丹麦技术大学的 Birgitte Thestrup 博士、Paul Michael Petersen 博士和 O. Bang 教授；以及德国 LISA 激光器产品公司的 S. Lamrini 博士和 P. Fürberg 博士。我也要感谢我的同事们：A. B. Seddon 博士，E. C. Larkins 博士，P. Sewell 博士，A. Vukovic 博士，D. Furniss 博士，Z. Tang 博士，R. Mackenzie 博士。特别感谢 T. M. Benson 教授对本书草稿的阅读指导。最后，我还要感谢我的博士生Ł. Sójka 对

本书第7章的贡献。

本书使用 MathWorks 公司的 MATLAB 软件。关于此产品信息，可与以下地址联系：

The Mathworks, Inc.
3 Apple Hill Drive
Natick, MA 01760 - 2098 USA
Tel: 508 - 647 - 7000
Fax: 508 - 647 - 7001
Email: info@ mathworks. com
Web: www. mathworks. com

作者简介

斯瓦沃米尔·苏耶茨基（Sławomir Sujecki）于1993年毕业于波兰华沙科技大学电子信息技术学院，在光子器件建模和设计方向，于1997年和2010年分别获得华沙科技大学的哲学博士（PhD）和理学博士（DSc）学位。1998年，他受聘为波兰基尔科技大学讲师，并于1999年成为波兰华沙国立通信研究院的研究员。在2000年，苏耶茨基博士成为英国诺丁汉大学的研究助理，并于2002年受聘为该大学讲师。在2012年他被推选为诺丁汉大学副教授。苏耶茨基博士主要研究方向是激光器设计，特别是激光器二极管和光纤激光器。他参与了诸如Ultrabright、Bright. EU、Brighter. EU、FastAccess，Copernicus和MINERVA等欧洲学术组织相关研究项目，从事光子器件建模和设计领域的研究。

苏耶茨基博士曾荣获德国学术交流学会、英国议会、英国皇家学会和沃尔森基金会的嘉奖。他同时还是IEEE的资深会员、OSA终身会员以及NUSOD（光电器件数值仿真）学会的项目委员会成员。

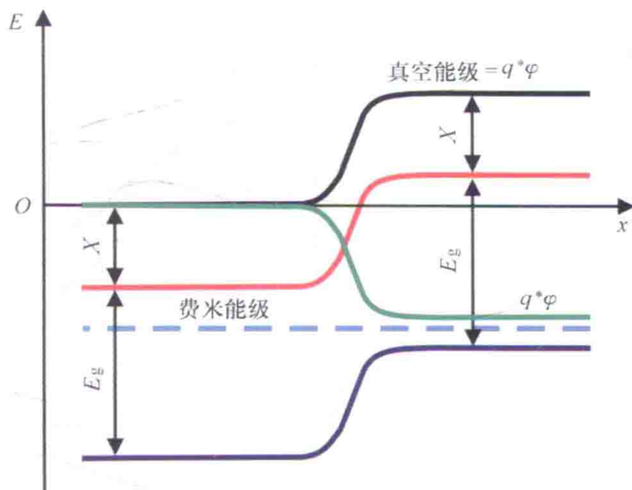


图6.2 p-n同质结的能级示意图，电势参考能级为n型半导体的真空能级

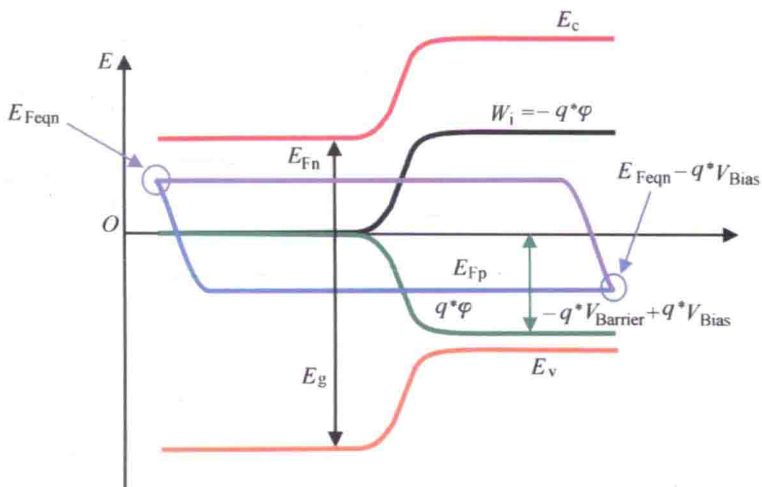


图6.6 偏置的p-n半导体同质结的能带示意图

目　　录

第1章　引　　论

建模和设计在光子学中发挥着重要的作用。随着计算机科学和技术的进步，建模设计工具越来越强大，在现代光子学器件开发中得到广泛应用。为了讨论特定的有典型意义的实例，我们考虑一个市面上随处可见的 C 衬底封装半导体激光器二极管（Laser Diode，LD）（如图 1.1 所示）。在其正常工作时，LD 在电流源泵浦下，会发射出相干光束（如图 1.2 所示）。因此，LD 的阴极和阳极，通常会使用金线键合与电导线相连。这样，电流源就可以方便地对 LD 驱动。LD 的表面通常会镀高透膜，光会从这个表面射出。LD 中电流注入和光射出的过程，同时会伴有发热和应力应变。因此，LD 芯片会焊接在衬底上，然后衬底会焊接在一个热沉（heat sink）上。通过合适的焊接工艺，热沉可以发挥散热的作用，而衬底则可减小应力应变。以上简单的介绍性质的讨论告诉我们，通常，LD 模型应该包括一个光学模型——其精确描述了器件内的载流子输运以及泵浦电流转换为光的过程，一个热力学模型——其可推导出器

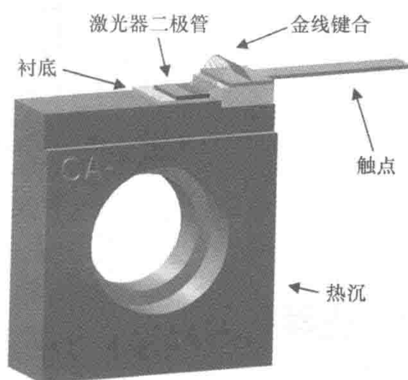


图 1.1　C 衬底激光器二极管示例

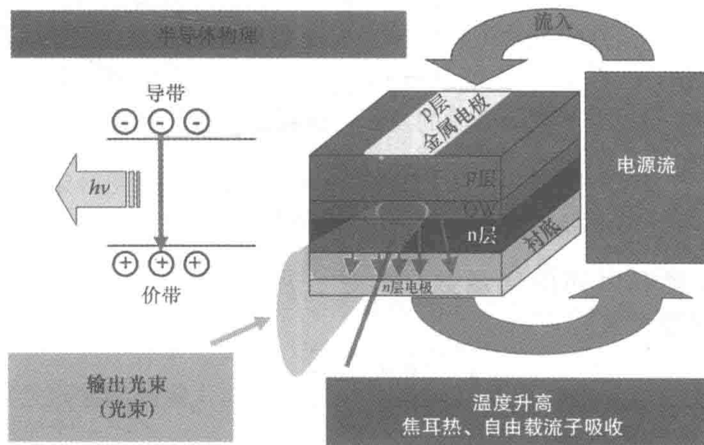


图 1.2　激光器二极管发光的物理过程

件工作温度以及最优的散热途径（如图 1.3 所示）。除此以外，LD 模型中还应包含应力应变模型，以计算应力应变张量场的分布。更通俗地讲，这个 LD 的实例告诉我们，光子学器件的建模和设计，原则上，涉及多个学科领域，需要熟知以下四个物理学分支，它们分别为：光传播理论、固体物理学（量子力学）、热扩散理论和弹性力学理论。

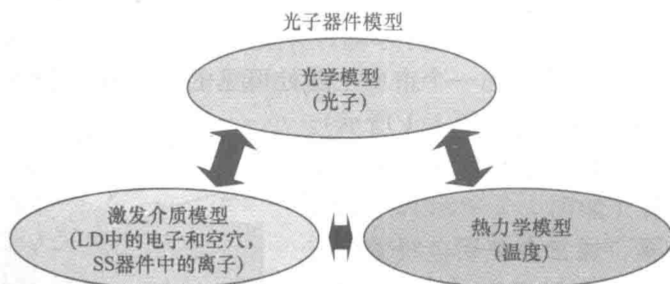


图 1.3 光子器件模型示意图

1.1 光学模型

现代光子学设计工具中的光学模型建模，基于麦克斯韦电磁场理论。电磁场理论得出，光可近似看作是一种电磁波。实际上，光是一种波的思想最早源于一个世纪以前的托马斯·杨。有趣的是，当代第一个光学理论称为几何光学，它认为光并不是一种波，而是排成一串小球构成。这一假说在 16 世纪和 17 世纪得到众多实验支持。虽然该假说受到惠更斯的强烈质疑，但几何光学还是在 18 世纪成为了一种成体系的光学理论。几何光学可以解释光的反射和折射现象，并在 17 世纪成功指导了望远镜的设计。在 18 世纪晚期和 19 世纪早期，越来越多的实验表明了光具有波动性。这些实验推动了波动光学的发展。该假说指出，光是一种波，且可由波动方程解出的标量函数描述：

$$\Delta u-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=0 \tag{1.1}$$

式中，u 为位置和时间的实函数；Δ 是拉普拉斯算子，它在笛卡儿坐标系 (x, y, z) 中可表示成：

$$\Delta u=\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2 u}{\partial^2 y}+\frac{\partial^2 u}{\partial^2 z}$$

常数 c 表示介质中的光速。

波动光学可以解释光的散射和干涉现象。但是它无法解释双折射现象——该现象最早发现于 17 世纪。这一问题随后催生了光的电磁波假说。即，光波可由四个矢量场完全描述，它们分别为：电场、磁场、电通量和磁感强度。这四个矢量场可

由麦克斯韦方程求得，对均匀介质，有

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t}$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \tag{1.2}$$

在无自由空间电荷情况下，方程（1.2）有以下条件约束，以消除奇异解：

$$\nabla \cdot D = 0$$

$$\nabla \cdot H = 0$$

方程（1.2）中各种未知场可由以下材料本构方程描述：

$$D = \varepsilon E$$

$$B = \mu_0 H \tag{1.3}$$

式中，ε 为介电常数；μ_0 表示自由空间磁导率。

虽然电磁波理论无法解释光的量子性现象，但是，在当今，它是在光子学设计中最完备的光学理论和建模工具。在20世纪，基于量子电动力学的更先进的理论得到了长足的发展。但它们因为较复杂，难以直接应用于光子学设计工具中。因此，描述主要光学特性的方法依然是传统理论。我们在第2～4章中，循序渐进地研究光的传播理论，并在第7、8章中将其应用于有源器件建模，以及在第9章中对非线性介质内光的传播进行建模。

1.2　激发介质模型

激发介质模型基于量子力学原理。换句话说，对半导体器件，我们需要考虑两种现象：电流传导以及电流中的电子与光子的相互作用。半导体晶体由相对较大的原子交织而成。比如，镓原子有31个电子。不过，根据半导体物理，只有电子层外层的少数电子才能形成电流，并与光场进行有效的能量交换。在一个半导体晶体中，电子层外层的电子不被某一个原子核束缚。因此，它们的能量较稠密，可以分为两个能带：导带和价带。在这两个峰值能带间的能带带隙，对确定某一半导体的光学性质起到关键作用。这是因为，电子与光子相互作用的一个主要模式，就是电子从导带掉落到价带（带间跃迁），在这一过程中将能量以光子的形式释放出去。这一过程需要满足带隙能量等于光子频率与普朗克常数的乘积这一条件。因为带隙能量是一个半导体的一种本征属性，所以这一条件决定了一个半导体材料与其组成的光器件工作波长之间的关系。例如，GaN 激光器发出蓝色波段的光，而 GaAlAs 激光器发出接近 1μm 波长的光。

如前文所述，在一个半导体中，只有导带和价带的电子会参与电流。对导带的情况，传统上用带正电的电荷（空穴）输运表示导带失去电子。因此，求解半导体内部电流最简单易懂的模型，包括一个导带电子方程和另一个独立的价带空穴方

程。因此，在半导体材料内部，电子和空穴在空间垂直方向会形成一个内建电场。因此，这个模型还应包括一个可以计算电场空间分布的方程。这三个方程完整描述了半导体材料中电子和空穴的输运，它们即我们在文献中常见的漂移－扩散方程：

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J}_{\mathrm{n}} = qR$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{J}_{\mathrm{p}} = -qR \tag{1.4a}$$

$$\nabla \cdot (\varepsilon_{\mathrm{w}} \nabla \phi) + q(p - n + N_{\mathrm{D}}^{+} - N_{\mathrm{A}}^{-}) = 0 \tag{1.4b}$$

式中，向量 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{n}}$ 和 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{p}}$ 分别是电子和空穴电流密度；R 表示净复合率；q 为电子电荷；ϕ 表示电势分布；p 和 n 分别是电子和空穴密度分布；N_{D}^{+} 和 N_{A}^{-} 分别为施主和受主浓度；ε_{w} 为静电电容率。

因为对 LD 建模，并不需要方程（1.4）的精确解，所以方程（1.4）有时会近似表示为一个单极扩散方程：

$$D_{\mathrm{n}} \nabla^2 N - R + \frac{J}{qd} = 0 \tag{1.5}$$

式中，D_{n} 表示扩散常数；N 是载流子浓度；J 是注入电子密度；d 为量子阱宽度。第 6 章将讨论半导体中的电流输运，而第 8 章将研究 LD 中的电子和光子相互作用。

若干重要的光子学器件基于镧系原子电子能级与光子的相互作用工作。研究镧系原子属性是原子光谱学的范畴。B. R. Judd 和 G. S. Ofelt 在 20 世纪后半叶提出了一个完备的模型，可以表征红外和可见光与镧系原子的相互作用[1]。该理论假设光子与镧系原子的 4f 电子层电子发生相互作用。第 7 章将会讨论这种光子与镧系原子的相互作用。

1.3 热扩散和应力应变模型

研究固体光子学器件中的热扩散，有助于优化器件内的热管理。当前理论假设，在器件内，热扩散通过热传导过程进行。热通量以单位面积的热功率计算，单位为瓦特（W），它与温度梯度成正比。热传导方程包括流入单位体积的净热通量、自发产生的热和单位体积内存储的热能量，它可写为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T + H = c \frac{\partial T}{\partial t} \tag{1.6}$$

式中，T 表示温度分布；H 是发热率；c 是容积热容；$\boldsymbol{\kappa}$ 是导热系数。

当所有的常数可精确测量确定且发热率可知的情况下，我们可以得到光子器件内精确的温度分布。精确估计半导体器件的发热率很重要，必须谨慎处理。另外，这个现有的模型可能无法满足能量守恒定律。我们将在第 5 章讨论热扩散的建模。

最后，我们注意，应力应变模型通常不作为器件模型的一部分。应力应变场一

般不直接影响光子器件发光的过程。但这不意味着应力应变分布不会影响光子器件的工作。例如，应 LD 中的应变量子阱[2]，以及集成光学中重要的应变诱导光波导[3]。当我们需要在光子器件建模中考虑应力应变时，可以用相关的专业工具，如 ANSYS™，来计算应力应变强度场分布。除此以外，也可以用一些近似分析表达式来计算应力应变[4]。我们在本书中将不会过多讨论计算应力应变强度场分布的方法，因为这个问题有非常多的相关文献[5]可供参考。

1.4 光子器件模型

在本章前三节的讨论中，我们看到，光子学设计和建模需要求解一组相对较复杂的偏微分方程组。一般来讲，只有通过数值方法和足够快的计算机才能求出这个解。在过去的二十年中，计算机技术突飞猛进。在今天，商用 PC 几个吉字节的内存、超过 1GHz 主频的多核处理器，足够支撑像求解偏微分方程这类的复杂问题。所以与二十年前不同，光子器件设计的相当部分工作不再需要昂贵的超级计算机。因此，在市场主导下，生产商用专业光子器件设计软件的软件公司，其利润和设计能力都得到了大幅提高。目前市场上有如下一些公司有相关产品用于设计半导体激光器、平面光波导、光纤和体光学器件。它们有 Optiwave、Photon Design、RSoft、Crosslight 和 TimberCad 等。建模和设计技术社区也在近二十年逐步发展起来。一些专业术语逐渐规范化以方便表示数值模型的各个属性。因为我们将在本书中使用这些术语，所以下面我们先对它们做一个简单的介绍。

光子器件模型中一个主要属性是它的维度。例如，一个三维模型（或称 3D 模型），是在三维空间中求解偏微分方程的数值解。严格意义上，一个 3D 模型就可得到偏微分方程较精确的解。更高的维度求得的解更精确，但更高的维度也会带来更大的计算开销（如图 1.4 所示）。计算效率最优是模型维度不超过三维的主要原因。高计算效率模型一般用于遍历搜索设计参数空间。当设计参数空间足够窄时，速度较慢但精确的设计软件会使用完整的 3D 模型微调设计参数。我们也可以通过完整的 3D 模型更深入地理解光子器件的工作原理。这两种模型的组合可以缩短设计时间，从而缩短新光子器件的上市时间，减小设计成本（减少计算机资源和设计工时）。因此，一般在设计流程中，设计软件会支持多种维度，以兼顾减小总设计开销。

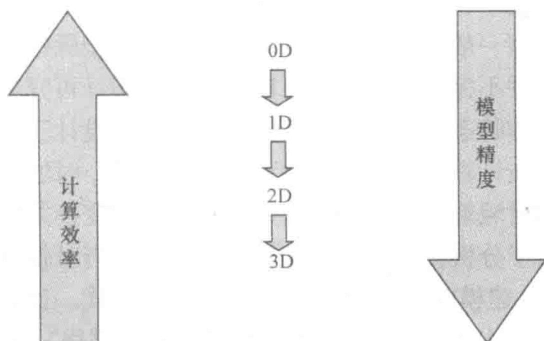


图 1.4 0D、1D、2D 和 3D 模型的取舍

另两个光子学工程中重要的概念分别是机理模型和现象模型。机理模型基于由某一物理理论的基础方程的解构成模型。当我们研究光和物质相互作用时，最基础的物理理论是量子电动力学[6,7]。不过，这个理论过于复杂，无法直接应用于光子学设计和建模中。实际上，求解氦原子（2 个电子）的薛定谔方程已经很困难，而光子学应用中的大多数原子或离子带有超过 30 个电子，例如，Ga（31 个电子）和三价饵离子（65 个电子）。这导致光子学设计直接使用机理模型几乎是不可能的。虽然如此，机理模型可以与其他模型一起使用，这意味着该模型由最基本的方程式和极少数的主观变量构成。机理模型的定义一般冗长且有些意义含糊不清，因此我们要求使用机理模型之前必须要解释清楚它的确切含义。现象模型，一般是基于实验结果直观得到的模型。现象模型存在大量的主观变量。开发一个现象模型使之可以成为一种实用设计工具并不是一件轻松的工作，它通常需要对光子学和特定的设计问题有非常深刻的理解。

光子学建模和设计中另一个重要的概念是预测模型。预测模型可以用于计算在一个参数或一组参数改变时器件特性的变化。因此，当一个预测模型中特定的参数和器件特性具有可预测性时，它非常方便于实践应用。另外，预测模型只能在一个特定的参数范围具有可预测性。例如，高功率 LD 模型在给出一组偏执电流的中间值的情况下，可以较准确地计算输出功率，但它无法计算出峰值输出功率（即只能在一个特定偏置电流值范围内预测光 - 电流特性）。预测模型是光子器件设计中最重要的一种模型。精确的（预测性）的设计工具可以显著减少产品开发时间可开销。但这不代表非预测性设计工具无法在现代光子器件开发中使用。实际上，很多情况下，从只能再现实验现象的模型中同样可以得到非常有实用价值的信息。这些模型一般在现代光子器件开发的早期步骤中发挥关键作用。因为在这一阶段，我们还并不完全清楚器件可能的工作状态。可完美再现实验结果的模型可以识别出器件工作状态的变化，从而为开发预测性设计工具提供基础。

在计算电磁学中，模型可分为两类：时域模型和频域模型。时域模型基于方程组的时域解，而频域模型则基于傅里叶变换并得到频域解。这两种类型的模型同样可用于分析光波导中的光传播。但是，当对较复杂结构的光子器件进行建模时，例如 LD 建模时，模型会有不同的分类方式。比如，LD 设计模型分别为三种：时域模型、连续波（CW）模型和多波长（谱线）模型。CW 模型假定器件特性处于稳态。时域模型则同时支持瞬态建模和稳态分析。CW 谱线模型无法用于仿真瞬态，但是它可以预测（或再现）激光器光谱。实际上，谱线模型是一种频域模型，它可以在宽频谱范围内进行频谱分析。这三种模型的区别将在第 8 章中进行研究。

我们另外还要介绍一下分析模型和数值模型。分析模型基于器件工作方程组的分析解，而数值模型则基于方程组求解的数值方法。分析模型虽然非常重要，但是它在光子学设计中有很多局限性。光子学设计工程师遇到的大多数问题，都需要数值建模技术解决。我们将在本书中讨论这些数值建模技术。

计算机技术的发展同样推动了计算机程序开发环境的发展。最初，大多数光子学软件都是使用例如 Fortran 或 C + + 这些标准编程语言开发的。最近越来越多的光子学设计使用了如 MATLAB 这样的专业工程软件。我们将在本书中使用MATLAB以及 Python 开发实例。

参考文献

1. Judd, B.R., *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy*. 1963, New York: McGraw-Hill.
2. Erbert, G., et al., High-power tensile-strained GaAsP-AlGaAs quantum-well lasers emitting between 715 and 790 nm. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1999. 5(3): p. 780–784.
3. Saitoh, K., M. Koshiba, and Y. Tsuji, Stress analysis method for elastically anisotropic material based optical waveguides and its application to strain-induced optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(2): p. 255–259.
4. Chow, W.W. and S. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*. 1999, Berlin: Springer.
5. Sadd, M.H., *Elasticity, Theory, Applications and Numerics*. 2009, Oxford: Academic Press.
6. Sargent, M., M.O. Scully, and W.E. Lamb, *Laser Physics*. 1974, London: Addison-Wesley.
7. Marcuse, D., *Principles of Quantum Electronics*. 1980, London: Academic Press.

第2章　光在同性介质中的传播

在本章中，我们将讨论光在同性介质中传播的数值分析。读者在阅读本章前应具备波动光学、电磁光学和傅里叶光学的知识（见参考文献［1］、［2］）。我们将特别讨论傅里叶分析法的应用。在第2.1节，我们将讨论利用傅里叶分析研究光束在同性介质内传播的问题。在第2.2节，我们展开讨论傅里叶分析法，并研究光束的反射和折射。在第2.3节，我们将研究近轴和大角度近似的应用。在2.4节，我们将对包含体光学元件的光学系统进行建模。在本章中，我们同样会介绍一些随后章节可能会遇到的基础概念。有关光线光学法应用的概述可参考Poon和Kim的参考文献［2］。

2.1　傅里叶分析法

傅里叶分析法可以简单高效地计算同性介质传播过程中光束包络方程的变化。为了解释傅里叶分析法如何操作，我们引入笛卡儿坐标系（x，y，z）。考虑一种最简单的情况，光波的波矢沿着平面（x，z）传播。在这种情况中，波动函数u与空间变量y无关。因此，波动方程可以化简成

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=0 \tag{2.1}$$

为了在$u(x, z, t)$与时间关系调和的情况下求解方程（2.1），我们按照标准步骤，先导入一个复变函数$\tilde{U}(x, z)$，从而定义

$$u(x, z, t)=u(x, z)\cos(\omega t+\varphi)=\frac{1}{2}[\tilde{U}(x, z)e^{j\omega t}+\tilde{U}^*(x, z)e^{-j\omega t}] \tag{2.2}$$

式中，相位φ在复变波动函数$\tilde{U}(x, z)=u(x, z)e^{j\varphi}$中。将方程（2.2）代入方程（2.1），并将方程（2.1）乘以$e^{(-j\omega t)}$，按周期$T=2\pi/\omega$条件合并同类项后，可得到关于复变波动函数$\tilde{U}(x, z)$的方程：

$$\frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \tilde{U}}{\partial z^2}+k^2\tilde{U}=0 \tag{2.3}$$

式中，k等于$2\pi/\lambda_{med}$；λ_{med}为介质中测得的波长。另外，k还可定义为$2\pi n/\lambda$，其中λ为自由空间波长；n为介质折射率。

在同性介质中，即$k(x, z)$为常数时，偏微分方程（2.3）的解可以通过分离变量法轻松解出。求得的$\tilde{U}(x, z)$为

$$\tilde{U}(x,z)=A\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_z z} \tag{2.4}$$

两个常数 k_x 和 k_z 可取 $+\infty$ 到 $-\infty$ 之间的任意值，它们互有关联。A 为一任意常数。k_x 与 k_z 的关系可以通过将 $\tilde{U}(x,0)$ 代入方程（2.3）得到。它有

$$k_x^2+k_z^2=k^2 \tag{2.5}$$

因此，每一组 k_x 和 k_z 的取值，决定了方程（2.3）每一个解（2.4）。方程（2.4）中其他的常数也可由方程（2.5）得到。常数对 k_x 和 k_z 可以理解成是矢量（波矢量）在笛卡儿坐标系中 x 和 z 方向的分量（如图 2.1 所示）。由方程（2.5）可知波矢量 $\vec{k}$ 的绝对值等于 k。最后，在定义波矢量之后，由方程（2.2）可以得到原始方程（2.1）特解的空间－时间相关性。

方程（2.1）的解的特性取决于常数 k_x 和 k_z 的取值。当 k_x 等于零，对任意时刻 t，$u(x,z,t)$ 是 x 变量的常数函数。这说明光是沿着 z 轴传播的。当 k_x 不等于零，对任意时刻 t，$u(x,z,t)$ 是变量 x 的余弦函数，与变量 z 的关系则取决于 k_x 的取值。若 k_x 小于 k，则 $u(x,z,t)$ 也是变量 z 的余弦函数。这对应了光的传播方向与 z 轴呈一个角度的情况。假如 $k_x=k$，则 $u(x,z,t)$ 是变量 z 的常数函数。若 $k_x>k$，则 $u(x,z,t)$ 是 z 的指数函数。前一种情况对应了光沿着 x 轴传播，而后一种情况对应了隐失波沿 z 轴方向衰减。这三种情况如图 2.2 所示。

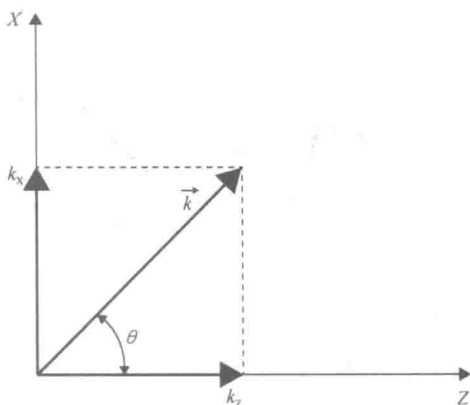


图 2.1　传播矢量在直角坐标系中的几何表示

我们讨论上述几种情况之后，会发现一个问题，如何在 $z=0$ 情况下 $\tilde{U}(x,0)$ 已知的条件下，计算在当 $z=L$ 时 $\tilde{U}$ 的分布，如图 2.3 所示。

首先，我们可知，若将方程（2.4）给出了 $\tilde{U}$，且 $\tilde{U}(x,0)$ 已知，可以直接计算 $\tilde{U}(x,L)$：

$$\tilde{U}(x,L)=\tilde{U}(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_z L} \tag{2.6}$$

对一个任意的 $\tilde{U}(x,0)$，我们可得到如下结论：如果我们可以将 $\tilde{U}(x,0)$ 表示为 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 函数线性相加（线性和）的形式，则可以较轻松地计算出每个函数的 $\tilde{U}(x,L)$，然后再将它们相加得出最终结果。实际上，用 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 的和表示任意一个波动函数 $\tilde{U}(x,0)$ 的最好方法就是使用傅里叶序列。在极限情况下，当 k_x 变化连续，我们可以通过对 $\tilde{U}(x,0)$ 进行傅里叶变换，用 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 函数表示 $\tilde{U}(x,0)$。

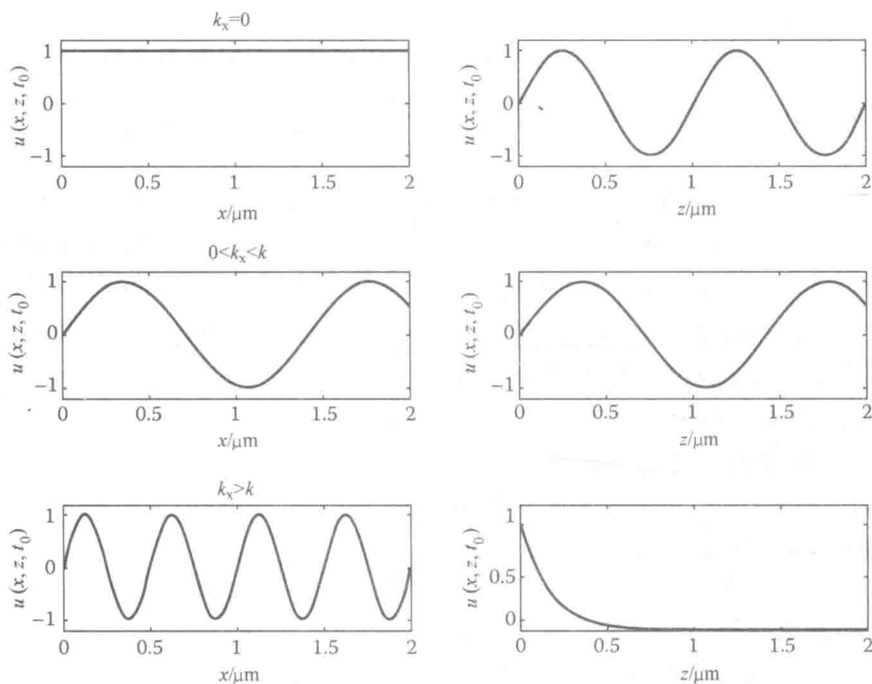


图 2.2　对 k_x 不同的三种取值，在任意时刻 t_0，$u(x, z, t)$ 与 x 和 z 的关系

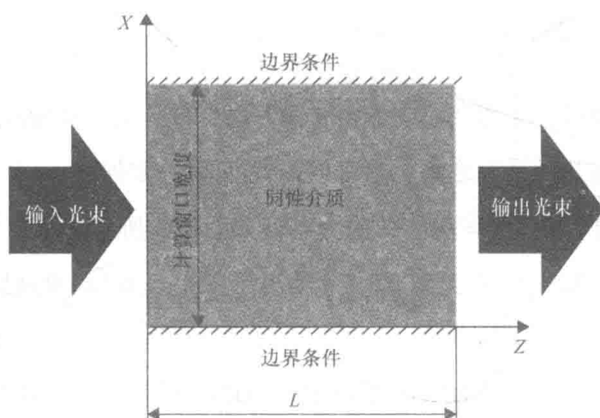


图 2.3　光束穿过同性介质传播问题的示意图

$\tilde{U}(x, 0)$对 x 的傅里叶变换为

$$\tilde{U}(k_x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(x, 0) e^{-j2\pi f_x x} dx \tag{2.7a}$$

其中 $2\pi f_x = k_x$。在 $z = L$ 的傅里叶域内，波动函数分布为

$$\tilde{U}(k_x, L) = \tilde{U}(k_x, 0)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_z L} \tag{2.7b}$$

而最后的和的结果，可以对式（2.7b）反傅里叶变换求积分得到

$$\tilde{U}(x, L) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(k_x, L)\mathrm{e}^{\mathrm{j}2\pi f_x x}\mathrm{d}f_x \tag{2.7c}$$

式（2.7）的方法可以用于分析计算光束的演进。不过，该方法要求光束的形状对其相应的积分是可解析的（参看参考文献［1，3－5］）。对于任意光束形状，数值方法更为方便。离散傅里叶变换法（DFT）相比式（2.7）的傅里叶变换，更易在个人电脑上运行。为了实现离散傅里叶变换，我们要在一个宽度为 $M\Delta x$ 的窗口内，以间隔 x_l 的宽度对 $\tilde{U}(x, 0)$ 等距离采样。其中 Δx 为采样间隔，M 为采样总数。在空间频率集 $k_{xm} = l/M\Delta x$ 内，我们对样本集 $\tilde{U}(x, 0)$ 进行 DFT 运算。每一个离散谐波遵循式（2.6），并通过反 DFT 得出最终的和。使用快速傅里叶变换（FFT）算法，可以简单高效地在计算机上执行 DFT 运算。该算法可参考大部分数值建模库和数值建模的教科书[6]。改写式（2.7），我们可以将该方法写为如下一组式子：

$$\tilde{U}(k_{xm}, 0) = \Delta x \sum_{l=0}^{M-1} \tilde{U}(x_l, 0)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}2\pi lm/M} \tag{2.8a}$$

$$\tilde{U}(k_{xm}, L) = \tilde{U}(k_{xm}, 0)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{zm}L} \tag{2.8b}$$

$$\tilde{U}(x_l, 0 = \frac{1}{M}\sum_{m=0}^{M-1} \tilde{U}(k_{xm}, 0)\mathrm{e}^{\mathrm{j}2\pi im/M} \tag{2.8c}$$

在上述讨论之后，我们下面介绍基本函数和基本函数集的概念。基本函数集都可通过数值方法求问题的解，并可以用标准编程语言编程执行算法。例如，$\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 是一个基本函数，而对所有的 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$，$k_x$ 在 $-\infty$ 到 $+\infty$ 之间取值的函数集合就组成了一个基本函数集。之所以要介绍基本函数集，是因为并不是对任意一个 $\tilde{U}(x, 0)$，都可以直接数值计算 $\tilde{U}(x, L)$ 的。不过，如果 $\tilde{U}(x, 0)$ 是一个 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 函数或它们的和函数形式，则可以直接算出 $\tilde{U}(x, L)$。因此，利用 $\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_x x}$ 基本函数可以简化数值计算。选择基本函数集的问题在于哪一类函数可以用所选的基本函数集表示（或者说，哪一类基本函数集可以构成能够通过函数解析处理问题的密集子集[7]）。基本函数集通常无法表示所有的函数。通过基本函数的线性组合表示函数集的方法如我们熟知的傅里叶序列理论，以及相关的所有 L^2 可积函数类[7]。该函数类包含了几乎所有与光束形状相关的函数，通过傅里叶分析法这一实用的工具，研究光束在同性介质中的传播。最后，需要声明的是，读者并不需要了解泛函分析已理解上述内容。更多关于这一课题的信息可参阅参考文献［7，8］。

算法 2.1　光束在同性介质内传播的傅里叶方法

1. 开始；
2. 设定自由空间波长 λ；

3. 2N 中选出 N 个等间距 FFT 采样点；

4. 初始化：$z=0$，$\tilde{U}(x,0)$；

5. 计算 $\tilde{U}(x,0)$ 的 FFT；

6. 计算 $\tilde{V}(k_x,L)=\tilde{V}(k_x,0)e^{jk_zL}$；

7. 对 $\tilde{V}(k_x,L)$ 计算反 FFT 得到 $\tilde{U}(x,L)$；

8. 结束。

总结上述讨论，我们在算法 2.1 中列出傅里叶分析法的实现步骤。

在用编程语言实现算法 2.1 之前，需要对 $\tilde{V}(k_x,0)$ 的每个采样点计算 k_z。由方程（2.5）可得 k_z 的值为

$$k_z = \pm\sqrt{k^2-k_x^2} \tag{2.9}$$

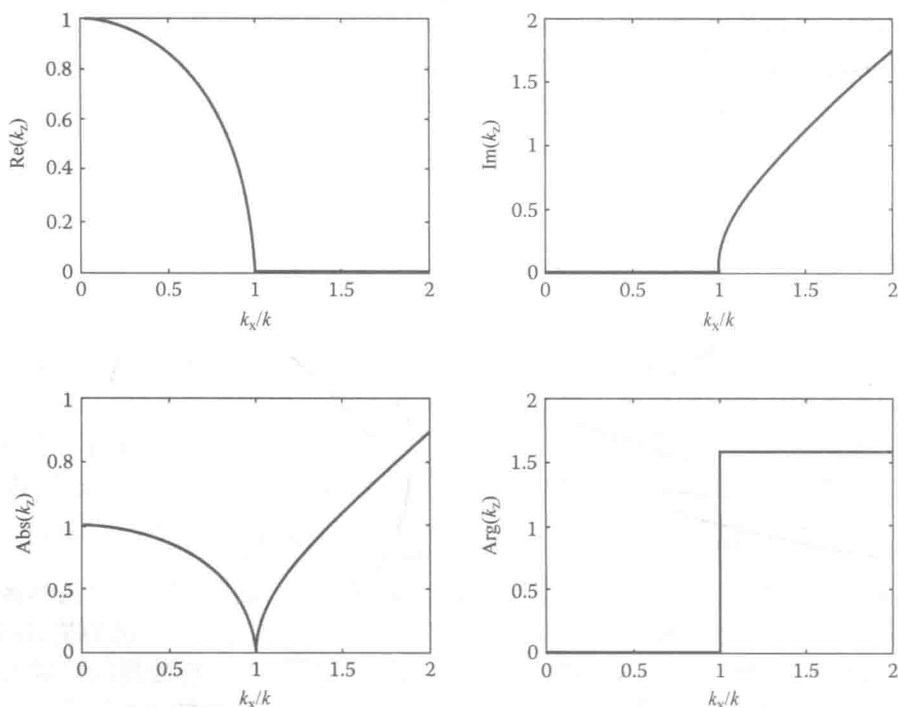


图 2.4 根据式（2.9），k_z 与 k_x 的关系

k_z 和 k_x 的关系如图 2.4 所示。对 $k_x>k$，k_z 是一个纯虚数，它代表一个指数递减或递增（见图 2.2）。式（2.9）的符号选择因此是维持算法 2.1 稳定性的关键。该符号选择应该保证隐失波是衰减的。错误选择符号会导致隐失波极度放大，破坏算法 2.1 的稳定性。我们将算法 2.1 以及上述的讨论直接以 MATLAB 脚本如下表示：

```
% Fourier Method propagation for a Gaussian shape optical beam
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e
% initial constants
I = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or I !
pi = 3.141592653589793e+000;

lam = 1.06;% wavelength [mi]
n = 1.0;% refractive index of the medium
k = 2*pi*n/lam;

 wind_width = 600;% numerical window width[mi]
 NoSamp = 2^12;% number of samples
 dx = wind_width/NoSamp;
 x_init = dx*(0:NoSamp-1);% x values
 x = x_init-wind_width/2;

 % calculating the initial beam distribution
 beam_width = 30;% beam half width[mi]
 teta = pi/24;%beam tilt angle
 E = exp(-x.*x/(beam_width*beam_width)).*exp(-I*k*x*sin(teta));
 Z(1,:) = abs(E).*abs(E);
 X = x;
 Y(1) = 0;

 dist_step = 60.;%propagation distance [mi]
 for m = 1:50
 kx = 2*pi*(-NoSamp/2:NoSamp/2-1)/(NoSamp*dx);
 % calculating the values of kx
 %calculating kz and changing the sign of the imaginary part to
 %keep stable
 kz = sqrt(k^2-kx.^2);
 mask1 = imag(kz)>0;
mask2 = imag(kz)< = 0;
kz = -mask1.*kz+mask2.*kz;
%calculating the field at the next z position
fE = (fft(E));
fE = fftshift(fE);
fE1 = fE.*exp(-I*dist_step*kz);
fE1 = ifftshift(fE1);
E1 = ifft(fE1);% field at position z = dist
E = E1;
Z(m+1,:) = abs(E).*abs(E);
Y(m+1) = m*dist_step;
end

contourf(X,Y,Z,'EdgeColor','none')
xlabel('x/micrometers','Fontsize',20)
ylabel('z/micrometers','Fontsize',20)
colormap cool
```

注意 fftshift 命令用来将零频率点频移到频谱中心。这对应了 MATLAB FFT 算法计算 DFT 的计算区间从 $0 \sim M$ 移动到 $-M/2 \sim M/2$。FFT 算法通过这一频移简化 DFT 计算 k_x 值的过程。频移之后，k_x 值从 $-\pi/M \sim \pi/M$ 线性增长。而且，我们对 k_z 的虚部符号取反以保证隐失模始终是衰减的。在这一脚本中，将 3mm 分为 50 步作为步长。虽然这一分割并不是必需的，且会带来更多计算时间的开销，但却因此方便 MATLAB 的 3D 描点命令来进行传播波束演进分析。

最后需要讨论的是数值窗口长度和采样率的问题。这一问题是 FFT 应用的普遍问题，所以请读者参考参考文献［6］。在这里，我们只考虑若干个实例样本，反映算法 2.1 的主要困难，并在光束传播的数值分析部分进行讨论。

首先，我们考虑高斯光束的平面波实例，它沿着与 z 轴呈 θ 角的方向传播：

$$\tilde{U}(x, L) = \mathrm{e}^{\left(\frac{x}{w}\right)^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}kx\sin(\theta)} \tag{2.10}$$

高斯光束式（2.10）在同性介质中以 α 角传播 L 距离（如图 2.5 所示）[9]。在沿着 x 轴 $z=0\mu\text{m}$ 处，$1/e$ 点，测量高斯波包的初始半宽为 w。仿真中波长为 $1.06\mu\text{m}$，现实中为 Nd:YAG 激光器的典型工作波长。相对折射率在仿真中设为 1。

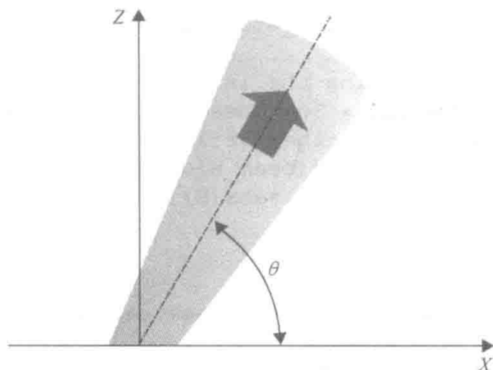


图 2.5　离轴传播光束示意图

图 2.6 所示为算法 2.1 以不同采样数量计算在 $z=10\mu\text{m}$ 处的光强分布。倾角 $\theta=0°$ 时的初始光束宽度等于 $2.828\mu\text{m}$。计算窗口宽度为 $600\mu\text{m}$（见图 2.3）。我们可以看到，当样本数较少时，波束形状较粗糙。当增加样本数量后，解的精度也得到提升。图 2.6 还反映出，当样本数量超过 2^{12} 之后，增加样本数量无法再提高解的精度。

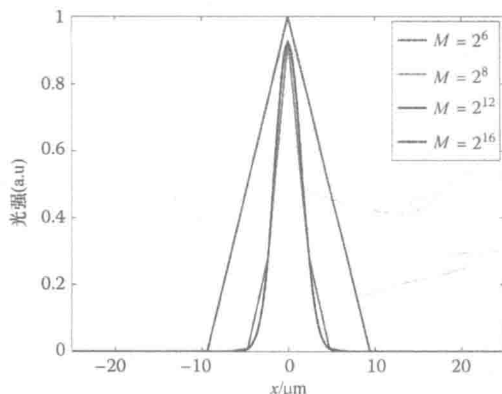


图 2.6　算法 2.1 计算在 $z=10\mu\text{m}$ 处的光强分布。倾角 $\theta=0°$ 时的初始光束宽度等于 $2.828\mu\text{m}$，计算窗口为 $600\mu\text{m}$

当倾角不等于零时，样本数量对解的精度的影响会更复杂。图 2.7 所示为算法 2.1 以不同采样数量计算在 $z=10\mu m$ 处的光强分布。计算窗口宽度和初始光束半宽 w 保持不变。倾角 $\theta=45°$。在这种情况中，低采样率得到的解显示，尽管大倾角造成相位快速变化，但光束还是基本沿着 z 轴方向传播的。在定性上这是一个错误的结论。只有当采样率足够大时，才可能得到正确的光束传播方向。为了从根本上解释这一现象，我们画出在 $z=0$ 处初始场的光强分布、DFT，和 $z=L$ 处的场分布，对应 2^{12} 和图 2^8 的采样率，如图 2.8 和图 2.9 所示。图中竖线表示传播波对应的 k_x 和隐失波对应的 k_x 所代表的边界。竖线中间为傅里叶域内计算频谱相对较易的区域。图 2.7 显示，如果样本数超过 2^{12} 后继续增加样本，并不会对精度有提升。图 2.8 显示，初始场的 DFT 的 k_x 并不为零，而是在 $3/\mu m$ 和 $5/\mu m$ 之间。这与我们的期望相吻合，实际上 45°方向传播平面波的 k_x 值等于 $4.2/\mu m$。但是，2^8 个样本的 DFT 计算出的 k_x 值没有超过 $2/\mu m$ 的部分。这一结果是因为 DFT 的计算窗口宽度与采样率有关所致。在傅里叶域中，低采样率实质上缩小了计算窗口。在本例中，2^8 样本数造成傅里叶空间的计算窗口限制在了 $2/\mu m$，而实际上沿 45°方向传播的平面波的 k_x 值为 $4.2/\mu m$，这说明 2^8 样本数对应的计算窗口不够分析 45°光束传播。我们还可以根据奈奎斯特原理得出同样的结论。我们在本例中可以很容易地看出，2^8 样本数的计算结果不正确。算法 2.1 得出的看似正确的结果，实际上在进行更详细的考察之后被证明是错误的。因此，当我们使用这个算法时，需要特别留意考察样本数是否足够解决问题。

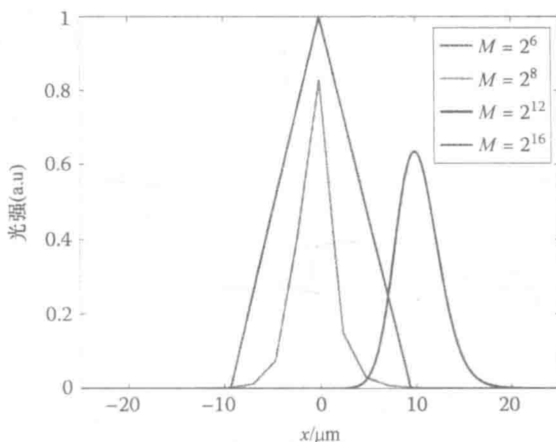


图 2.7　算法 2.1 以不同采样数量计算在 $z=10\mu m$ 处的光强分布，倾角 $\theta=45°$时的初始光束宽度等于 $2.828\mu m$，计算窗口为 $600\mu m$

在下一个例子中，我们将研究另一个现象，它也是算法 2.1 数值分析的结果。图 2.10 所示为算法 2.1 计算出的光强分布。初始光束半宽等于 $30\mu m$，倾角 $\theta=75°$。计算窗口为 $600\mu m$。样本数为 2^8，传播距离为 $3000\mu m$。为了能更简单的理解仿真得到的结果，我们不再直接计算 $z=L$ 处的场，而是沿着 z 轴进行 500 次迭代。通过对结果进行整理，我们可以得到光强的二维（2D）分布。结果显示，当光束接近计算窗口

的边界时，它会不合逻辑地穿入计算窗口的另一侧边界。这一现象是一个单纯的数值计算问题，可以通过用足够宽的窗口或添加特殊的透明边界条件避免这种现象的发生，我们将在光束传播算法中的“边界条件”部分做更详尽的讨论。

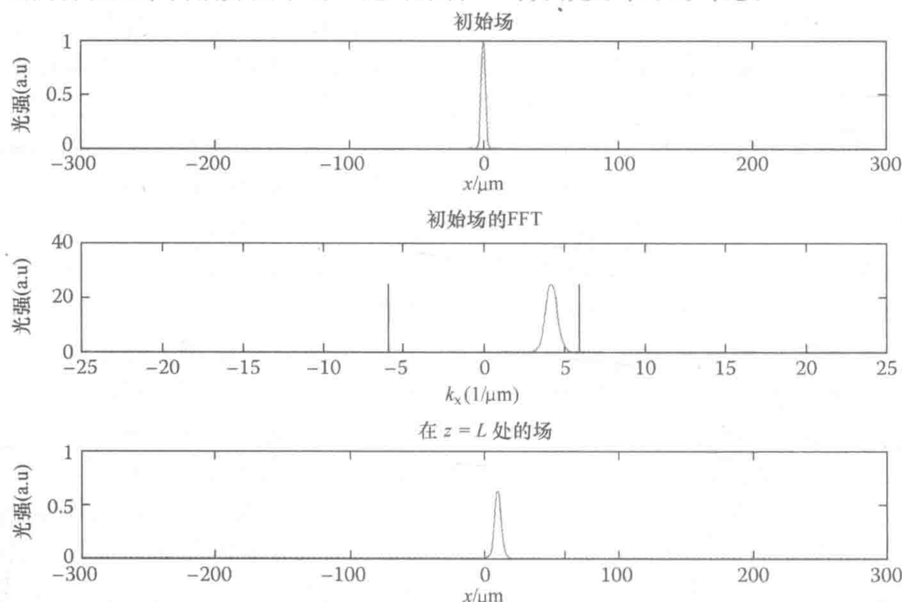


图 2.8 算法 2.1 以不同采样数量计算在 $z=10\mu m$ 处的光强分布，倾角 $\theta=45°$时的初始光束宽度等于 2.828μm，计算窗口为 600μm。样本数为 2^{12}

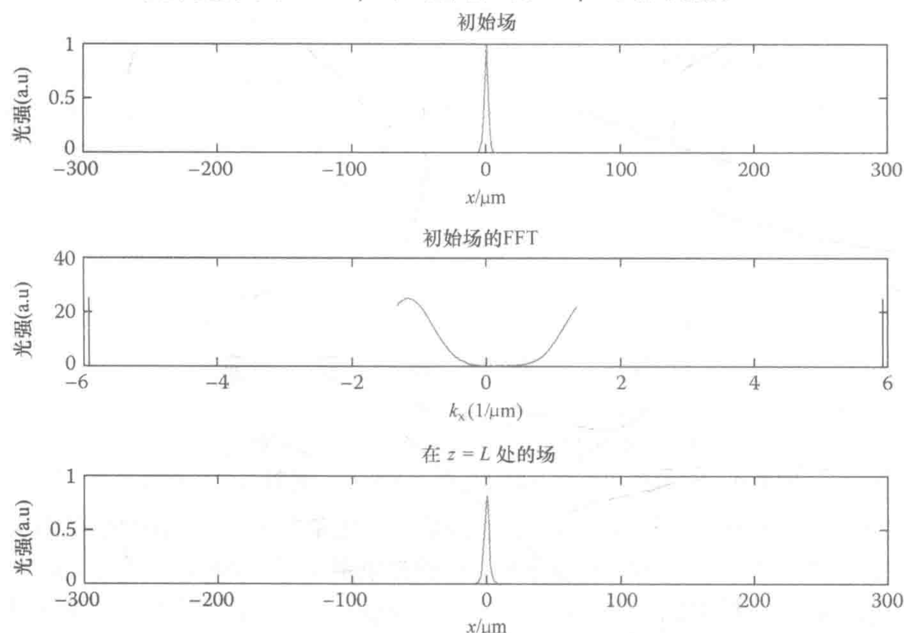


图 2.9 算法 2.1 计算的光强分布，倾角 $\theta=45°$时的初始光束宽度等于 2.828μm，计算窗口为 600μm，样本数为 2^8

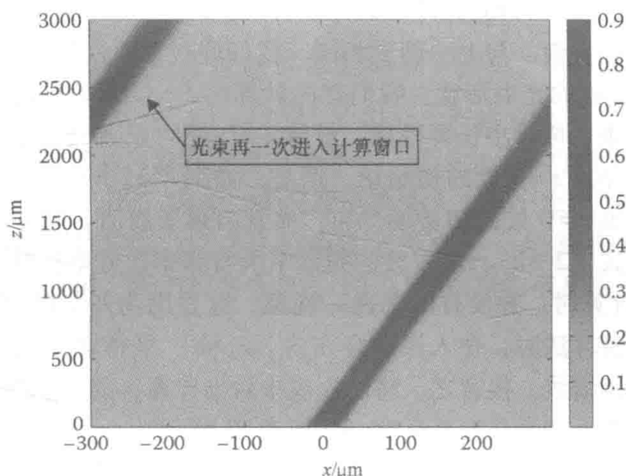


图 2.10　算法 2.1 计算的光强分布，倾角 $\theta=7.5°$时的初始光束宽度等于 30μm，计算窗口为 600μm。样本数为 2^8，传播距离为 3000μm

在本节中最后一个例子中，我们将研究算法 2.1 的数值稳定性和互反性。为了能使算法 2.1 方便研究光束传播，它必须具有数值稳定性，即不能出现解的数量不受控制的增长，最后造成数值上溢或下溢的现象。不仅如此，该算法还应该具有互反性，即在给定 $z=0$ 的初始场分布条件下，可以计算出 $z=L$ 的特定场分布，反之亦然。图 2.11 所示为算法 2.1 计算的光强分布。初始光束宽度为 30μm，倾角为

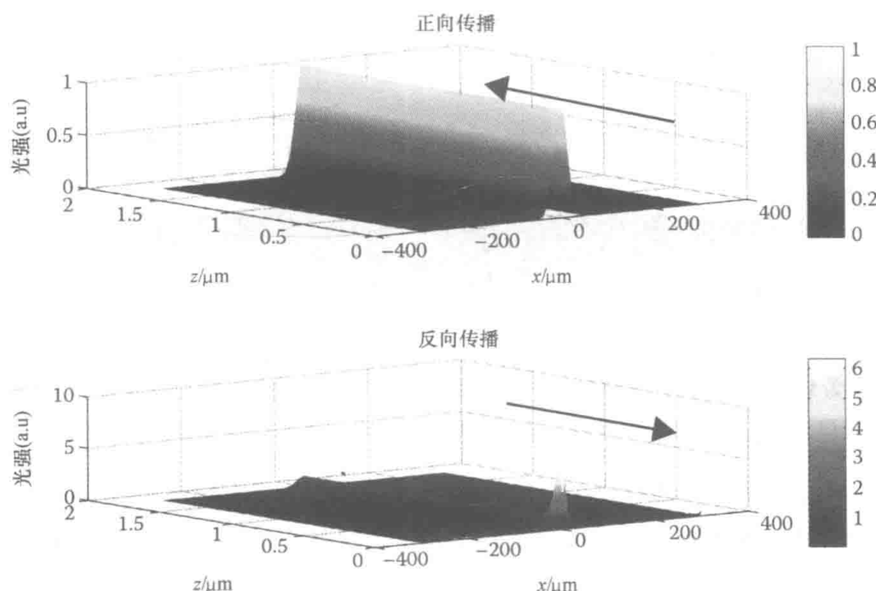


图 2.11　算法 2.1 计算的光强分布，倾角 $\theta=7.5°$时的初始光束宽度等于 2.828μm，计算窗口为 600μm，样本数为 2^{12}，传播距离为 1.8μm，箭头代表光束传播方向

$\theta=7.5°$。计算宽度为600μm，样本数为2^{12}，传播距离为1.8μm。图2.11中的箭头代表了光束传播方向。与上一例子相同，我们通过225次迭代计算的光束分布，得出在$z=1.8\mu m$处的光束形状。我们首先计算出$z=1.8\mu m$处的光强分布，然后尝试带入这个结果，传播步长再取反，计算$z=0$处的光强分布。如果算法具有互反性，则可以复原出$z=0$处的初始场。但是，如图2.11所示，结果不尽如人意。算法不但无法得出$z=0$处的初始场分布，而且出现了崩溃。这一现象实际上是步长取反时，根据式（2.8b），隐失波的频谱中所有频率成分呈指数放大所致。当用式（2.7）分析计算时，并没有出现这一现象。这是因为所有的运算都是精确的。但是，当使用数值算法时，舍入误差会在式（2.8b）呈指数放大的隐失模成分所对应的频率产生伪谱线。换言之，将隐失模排除出计算，则对本例而言，如果采样较粗糙时，算法2.1完全具有互反性（如图2.12所示）。

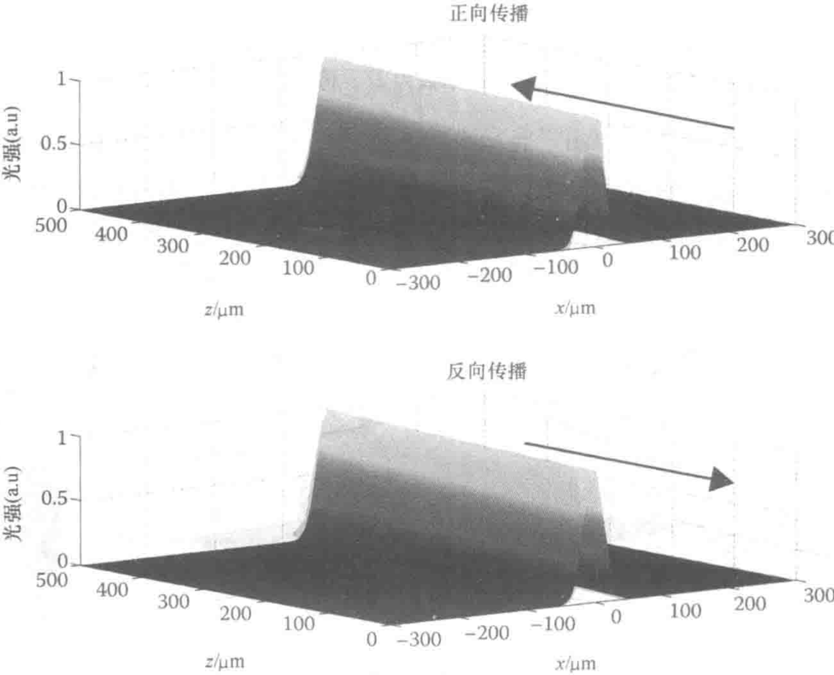


图2.12　算法2.1计算的光强分布，倾角$\theta=7.5°$时的初始光束宽度等于30μm，计算窗口为600μm，样本数为2^8，传播距离为500μm。箭头所指代表了光束的传播方向

另一个需要考虑的重要问题，是算法2.1所得结果是否能量守恒。任何解决物理问题的算法，原则上应当是遵守物理学基本定律的。物理学的一个基本定律是能量守恒。根据该定律，如果在问题求解区内无外界光源，则在$z=0$处进入这个区域的总能量应该等于从$z=L$处离开这个区域的总能量。波动光学假设光强度正比

于 $|\tilde{U}(x, z)|^2$[1]。光强的单位为 W/m^2，因此对一个给定横截面计算光强的积分，原理上，等于这一截面的总能量除以单位时间。因此，我们可以推测沿 x 轴 $|\tilde{U}(x, 0)|^2$ 的积分应该等于 $|\tilde{U}(x, L)|^2$ 的积分。严格意义上讲，因为我们只考虑二维情况，所以这样的计算是能量密度守恒。理论上，具有特定物理意义精度的数值算法称为辛算法[10,11]。因此，我们希望算法 2.1 是一个满足能量守恒的辛算法。首先，我们需要证明式（2.7）的能量守恒并不一定意味着一般情况下式（2.8）也满足能量守恒。我们首先考虑式（2.7）。根据帕塞瓦尔定理，有

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{U}(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{U}(f_x, 0)|^2 df_x$$

以及

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{U}(x, L)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{U}(f_x, L)|^2 df_x$$

由此，我们可以得到

$$|\tilde{U}(f_x, L)|^2 = \tilde{U}(f_x, L) * \tilde{U}(f_x, L)^* = \tilde{U}(f_x, 0) e^{-j\sqrt{k^2 - 2\pi f_x^2}} * \tilde{U}(f_x, 0)^* e^{-(j\sqrt{k^2 - 2\pi f_x^2})^*}$$

如果 f_x 对应了传播波，则 $j\sqrt{k^2 - 2\pi f_x^2}$ 是一个纯虚数。因此有 $|\tilde{U}(f_x, L)|^2 = |\tilde{U}(f_x, 0)|^2$。但对于隐失波，$j\sqrt{k^2 - 2\pi f_x^2}$ 是一个纯实数，所以 $|\tilde{U}(f_x, L)|^2 \neq |\tilde{U}(f_x, 0)|^2$。因此，假如光束的频谱只包含传播波，则能量是守恒的。但一般情况下，能量是不守恒的。与此相似，对式（2.8），由帕塞瓦尔定理可得

$$\sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(k_{xm}, 0)|^2 = \frac{1}{M} \sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(x_l, 0)|^2$$

以及

$$\sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(k_{xm}, L)|^2 = \frac{1}{M} \sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(x_l, L)|^2$$

类比于式（2.7）的情况，对传播波有 $|\tilde{U}(f_x, L)|^2 = |\tilde{U}(f_x, 0)|^2$，而对隐失波则有 $|\tilde{U}(f_x, L)|^2 \neq |\tilde{U}(f_x, 0)|^2$。因此，对频谱只包含传播波的光束，能量是守恒的，即

$$\sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(k_{xm}, 0)|^2 = \sum_{l=0}^{M-1} |\tilde{U}(k_{xm}, L)|^2$$

一个算法是否满足能量守恒与其互反性紧密相关。实际上，我们可以看到，隐失模与算法 2.1 的互反性和能量守恒缺失紧密相连。这看起来是一个比较悲观的结论。但是，我们将在下一节中讨论隐失模的根源和本质，这会对我们理解这一问题有所帮助。

最后一个有待解决的问题是方法的理论严谨性。算法 2.1 是方程（2.1）的数值解方法。但方程（2.1）本身也是严谨理论——即麦克斯韦方程组——的近似。因此，我们需要研究基于方程（2.7）的算法的精度问题。本着这一目的，我们下面推导同性介质平面波的麦克斯韦方程组的解。我们只考虑各向同性的情况。

由麦克斯韦方程组和材料方程，我们可得到

$$\begin{cases}\left(\frac{\partial H_z}{\partial y}-\frac{\partial H_y}{\partial z}\right)\vec{i}_x+\left(\frac{\partial H_x}{\partial z}-\frac{\partial H_z}{\partial x}\right)\vec{i}_y+\left(\frac{\partial H_y}{\partial x}-\frac{\partial H_x}{\partial y}\right)\vec{i}_z=\mathrm{j}\omega\varepsilon(\vec{i}_xE_x+\vec{i}_yE_y+\vec{i}_zE_z)\\ \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}-\frac{\partial E_y}{\partial z}\right)\vec{i}_x+\left(\frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial x}\right)\vec{i}_y+\left(\frac{\partial E_y}{\partial x}-\frac{\partial E_x}{\partial y}\right)\vec{i}_z=-\mathrm{j}\omega\mu_0(\vec{i}_xH_x+\vec{i}_yH_y+\vec{i}_zH_z)\end{cases} \tag{2.11}$$

式中，$\vec{i}_x$，$\vec{i}_y$，$\vec{i}_z$ 分别是沿着 x，y，z 轴的单位向量。如果向量场的每个分量相等，则方程组（2.11）两边的向量场就相等。从而，按照方程组（2.11）两边的向量场分量，我们可以将方程组（2.11）分为六组方程组。对平面波，对所有场分量，有$\partial/\partial y=0$。所以，六组方程组可以分成三三一组的两个偏微分方程组：

$$\begin{gathered}\frac{\partial E_y}{\partial z}=\mathrm{j}\omega\mu_0H_x\\ \frac{\partial E_y}{\partial x}=-\mathrm{j}\omega\mu_0H_z\\ \frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial H_z}{\partial x}=\mathrm{j}\omega\varepsilon E_y\end{gathered} \tag{2.12a}$$

$$\begin{gathered}-\frac{\partial H_y}{\partial z}=\mathrm{j}\omega\varepsilon E_x\\ \frac{\partial H_y}{\partial x}=\mathrm{j}\omega\varepsilon E_z\\ \frac{\partial E_x}{\partial z}-\frac{\partial E_z}{\partial x}=-\mathrm{j}\omega\mu_0H_y\end{gathered} \tag{2.12b}$$

方程组（2.12a）中的三个方程表示了电磁场的 E_y，H_x和 H_z分量。方程组（2.12b）则表示了 E_x，E_x和 H_y分量。可以很清楚地看到，方程（2.13a）对应了 y 极化波，而方程（2.13b）则对应了 x 极化波。任意一个偏振相的波都可以表示为这两个极化波的叠加形式。化简消除方程组（2.12a）的 H_x和 H_z，可以得到

$$\frac{\partial^2E_y}{\partial x^2}+\frac{\partial^2E_y}{\partial z^2}+k^2E_y=0 \tag{2.13a}$$

同样，消除方程组（2.12b）中的 H_y和 E_z，可得

$$\frac{\partial^2E_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2E_x}{\partial z^2}+k^2E_x=0 \tag{2.13b}$$

方程（2.13a）与方程（2.3）有相同的形式，因此可以由算法 2.1 直接求解。

这表明，算法 2.1 是求解麦克斯韦方程组的一种严谨方法。方程（2.13）表明，函数 $\tilde{U}(x, z)$ 可以解释为 E_x 和 E_y 都与假设的光的初始偏振相有关。对某一偏振光，当用算法 2.1 解出 $\tilde{U}(x, L)$ 时，电磁场的其他分量可以由方程组（2.12a）和（2.12b）算出。两种偏振的差别实际上是一束光照到两个同性介质交界面时的差别。我们将在下一节讨论这一情况[12]。

2.2　光束反射和折射

在解释光束从一种同性介质入射到另一同性介质的现象时，波动光学和电磁光学的差别更加明显。针对两个同性区构成的同性介质层，傅里叶方法可以相对简单地分析光束其中的传播情况。这两种同性区如图 2.13 所示。当入射光是一个平面光时，我们可以简单地推导出反射和透射系数表达式。我们知道，当一束平面波在区域 1 和 2 的界面入射时，将会发生部分反射和折射（如图 2.14 所示），见参考文献［1，12］。当入射光如式（2.4）定义，则可以相对简单地算出反射和投射系数，它们定义为

$$R = \frac{A_r}{A_i} \tag{2.14a}$$

$$T = \frac{A_t}{A_i} \tag{2.14b}$$

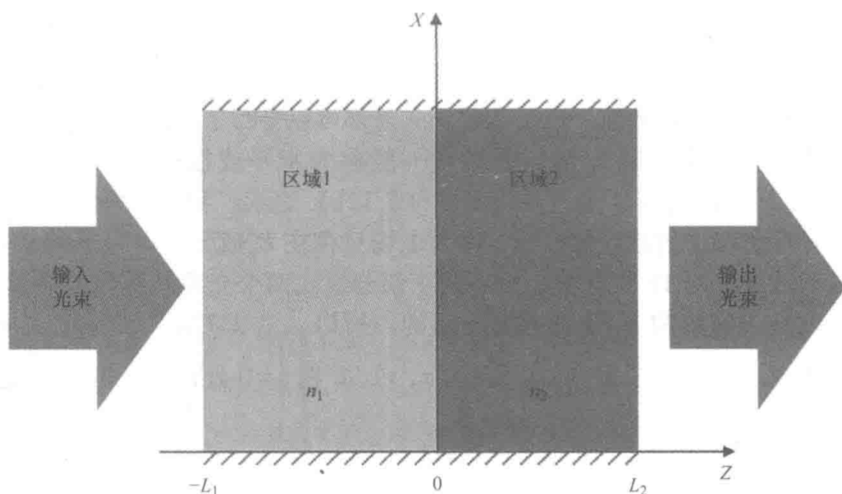


图 2.13　光束透过两个同性区介质传播的示意图

式中，A_i，A_r 和 A_t 分别为入射、反射波和透射波的幅度。为了推导系数 R 和 T，我们首先分别写出入射波、反射波，和透射波的表达式：

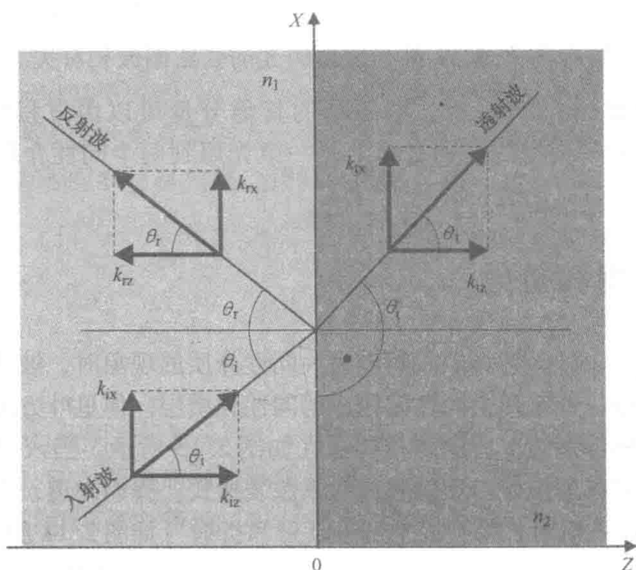


图 2.14 两个同性区域边界上的反射和折射

$$\tilde{U}_i(x,\ z)=A_i\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{ix}x}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{iz}z}$$
$$\tilde{U}_r(x,\ z)=A_r\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{rx}x}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{rz}z}$$
$$\tilde{U}_t(x,\ z)=A_t\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{tx}x}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}k_{tz}z} \tag{2.15}$$

很多参考书（如参考文献 [1, 12]）都对两个电介质边界的波反射问题有详细的研究，所以我们只简要推导一下反射和投射系数。在区域 1 和 2 的平面边界上，存在两种不同方向的波。电场和磁场矢量都可以平行于边界。前者在文献中称为垂直或横向电极化（TE）波，而后者一般称为水平或横向磁极化（TM）波。TE 波由式（2.12a）表示，而 TM 则由式（2.12b）表示。我们首先考虑 TE。由电场角度推导反射和透射系数较容易，因为电场只存在 E_y成分，而它不随 $x-z$ 平面上的旋转而改变。对 TE 极化波，电场的正切分量在两个介质的交界上连续，因此 E_y连续。而且，磁场的 H_x 分量也是连续的。所以，由 2.12a，可得 $\partial E_y/\partial z$ 连续。因此，考虑式（2.15）中 $\tilde{U}(x,\ z)$和$\partial\tilde{U}(x,\ z)/\partial z$ 在 $z=0$ 处连续，可以导出下面两个式子：

$$\begin{cases}A_iA+A_r=A_t\\-k_{iz}A_i+k_{iz}A_r=-k_{tz}A_t\end{cases}$$

代入式（2.14）并考虑式（2.15）定义的 $k_rz=k_iz$，我们可以得到波矢量 z 分量的反射和透射系数表达式：

$$R=\frac{k_{iz}-k_{tz}}{k_{iz}+k_{tz}} \tag{2.16a}$$

$$T=\frac{2k_{\text{iz}}}{k_{\text{iz}}+k_{\text{tz}}} \tag{2.16b}$$

一般的，透射和反射系数，以及式（2.15）用入射角 θ_{i} 和两个介质的折射率 n_1 和 n_2 表示。我们按照这种格式重新改写式（2.15）和式（2.16），电场正切分量的连续性要求 $k_{\text{i}}x=k_{\text{r}}x$（等价于反射角等于入射角，当 $k_{\text{ix}}^2+k_{\text{iz}}^2=k_{\text{rx}}^2+k_{\text{rz}}^2=k_1^2$ 有 $k_{\text{i}}z=-krz$）。由该分量的连续性同样可得出 $k_{\text{i}}x=k_{\text{t}}x$，因此有 $n_1\sin\theta_{\text{i}}=n_2\sin\theta_{\text{t}}$，这就是由 θ_{t}、n_1、n_2，和 θ_{i} 表示的斯涅尔定律。最后，由图 2.15，我们可以推导出如下公式：$k_{\text{i}}z=k_1\cos\theta_{\text{i}}$，$k_{\text{i}}x=k_1\sin\theta_{\text{i}}$，$k_{\text{t}}z=k_2\cos\theta_{\text{ii}}$，以及 $k_{\text{t}}x=k_2\sin\theta_{\text{t}}$。因此，式（2.15）和式（2.16）可以如下表示：

$$\tilde{U}_{\text{i}}(x,\ z)=A_{\text{i}}\text{e}^{-\text{j}kn_1\sin\theta_1x}\text{e}^{-\text{j}kn_1\cos\theta_1z}$$

$$\tilde{U}_{\text{r}}(x,\ z)=A_{\text{r}}\text{e}^{-\text{j}kn_1\sin\theta_1x}\text{e}^{\text{j}kn_1\cos\theta_1z}$$

$$\tilde{U}_{\text{t}}(x,\ z)=A_{\text{t}}\text{e}^{-\text{j}kn_2\sin\theta_2x}\text{e}^{-\text{j}kn_2\cos\theta_2z} \tag{2.17}$$

和

$$R=\frac{n_1\cos\theta_1-n_2\cos\theta_2}{n_1\cos\theta_1+n_2\cos\theta_2} \tag{2.18a}$$

$$T=\frac{2n_1\cos\theta_1}{n_1\cos\theta_1+n_2\cos\theta_2}=1+R \tag{2.18b}$$

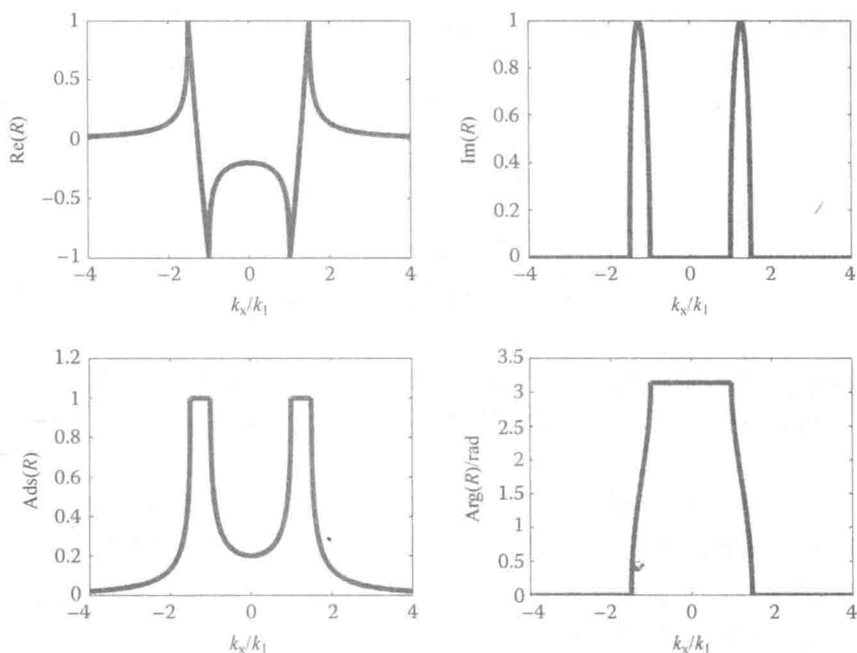


图 2.15　TE 极化波的反射系数与 k_x 的关系，$n_1=1.0$，$n_2=1.5$

由斯涅尔定律，与 θ_2 相关的项可以由入射角 θ_1 和两个介质的折射率 n_1、n_2 表示：$n_2\cos\theta_2=\sqrt{n_2^2-n_1^2\sin^2\theta_1}$。为了使用傅里叶变换算法的方便，$R$ 和 T 最好用 k_x，k_1 和 k_2 表示。当电场的正切分量连续时，可以得到 $k_x=k_{xi}=k_{xr}=k_{xt}$。因此，我们可以将 R 和 T 写为

$$R(k_x)=\frac{\sqrt{k_1^2-k_x^2}-\sqrt{k_2^2-k_x^2}}{\sqrt{k_1^2-k_x^2}+\sqrt{k_2^2-k_x^2}} \tag{2.19a}$$

$$T(k_x)=\frac{2\sqrt{k_1^2-k_x^2}}{\sqrt{k_1^2-k_x^2}+\sqrt{k_2^2-k_x^2}} \tag{2.19b}$$

对 TM 极化波，该表达式只需根据 H_y 的 z 偏导数等于 $-j\omega\varepsilon E_x$，做一点点修正。因此，对 TM 波，$\tilde{U}(x,z)$ 和 $1/\varepsilon\partial\tilde{U}(x,z)/\partial z$ 在 $z=0$ 点连续。按照与 TE 波相同的步骤，我们可以得到

$$\begin{cases}A_i+A_r=A_t\\ -\dfrac{k_{iz}}{n_1^2}A_i+\dfrac{k_{iz}}{n_1^2}A_r=-\dfrac{k_{tz}}{n_2^2}A_t\end{cases}$$

并由此得到

$$R=\frac{k_{iz}/n_1^2-k_{tz}/n_2^2}{k_{iz}/n_1^2+k_{tz}/n_2^2}\text{和 }T=\frac{2k_{iz}/n_1^2}{k_{iz}/n_1^2+k_{tz}/n_2^2}$$

与 TE 波类似，我们用 k_x 表示反射系数和透射系数：

$$R(k_x)=\frac{\dfrac{1}{n_1^2}\sqrt{k_1^2-k_x^2}-\dfrac{1}{n_2^2}\sqrt{k_2^2-k_x^2}}{\dfrac{1}{n_1^2}\sqrt{k_1^2-k_x^2}+\dfrac{1}{n_2^2}\sqrt{k_2^2-k_x^2}} \tag{2.20a}$$

$$T(k_x)=\frac{\dfrac{2}{n_1^2}\sqrt{k_1^2-k_x^2}}{\dfrac{1}{n_1^2}\sqrt{k_1^2-k_x^2}+\dfrac{1}{n_2^2}\sqrt{k_2^2-k_x^2}} \tag{2.20b}$$

请注意，当 $\theta=0$ 时，式（2.19）表示的反射系数和透射系数不等于式（2.20）。这是因为式（2.19）按电场（E_y）定义，而式（2.20）则按磁场（H_y）定义。

为了讨论的完整性，我们再以功率定义反射系数和透射系数。对 TE 波，波印亭矢量沿着波传播方向的分量（即沿着波传播方向的总功率通量密度）等于$(1/4)E_y^*E_y(1/Z^*+1/Z)$，其中 $Z=\sqrt{\mu_0/\varepsilon}$为介质的波阻抗。因此，反射和透射的功率通量密度之比（都沿着波传播方向）可以用 A_r，A_i 和 A 表示：

$$\overline{R}=\frac{A_rA_r^*}{A_iA_i^*} \tag{2.21a}$$

$$\overline{T}=\frac{\mathrm{Re}(n_1)A_tA_t^*}{\mathrm{Re}(n_2)A_iA_i^*}=1-\overline{R} \tag{2.21b}$$

通过在 $A_r=RA_i$ 两边乘以 A_r^* 得到 $A_r^*A_r=RA_i^*A_r$，系数 $\overline{R}$ 和 $\overline{T}$ 可以用 R 和 T 表示。同时，因为有 $A_r^*=R^*A_i^*$，所以有 $A_r^*A_r=R^*RA_i^*A_i=\overline{R}A_i^*A_i$，即 $\overline{R}=R^*R$。透射系数也可以这样处理。首先，我们有

$$\frac{A_t^*A_t}{A_i^*A_i}=T^*T\text{ 并因此有}\frac{\mathrm{Re}\ (n_1)}{\mathrm{Re}\ (n_2)}\frac{A_t^*A_t}{A_i^*A_i}=\frac{\mathrm{Re}\ (n_1)}{\mathrm{Re}\ (n_2)}T^*T=\overline{T}$$

所以可以推导出 TM 波的系数，即 $\overline{R}=R^*R$ 和

$$\overline{T}=\frac{\mathrm{Re}(n_2)}{\mathrm{Re}(n_1)}T^*T$$

最后，我们带入 $k_r=0$ 检验对一般的波入射，两个极化波的功率系数是相等的。

图 2.15 表示了对 TE 波，当 $n_1<n_2$ 时 k_x 与反射系数和透射系数 R、T 之间的关系。这种情况下，反射系数是一个纯实数，且当 $k_x=k_1$ 附近时为负。当 $(n_2/n_1)k_1>k_x>k_1$ 时，它变成一个纯虚数，而在 $k_x>(n_2/n_1)k_1$ 时为一个纯实数。当 $n_1>n_2$ 时（如图 2.16 所示），反射系数为 $(n_2/n_1)k_1$，它是一个实数，对应了全内反射角。当 $k_1>k_x>(n_2/n_1)k_1$ 时，它为一个纯虚数，而当 $k_r>k_1$ 时为一个纯实数。图 2.15 和图 2.16 同样表明，对足够大的 k_r 值的隐失模，两个区域的交界几乎是透明

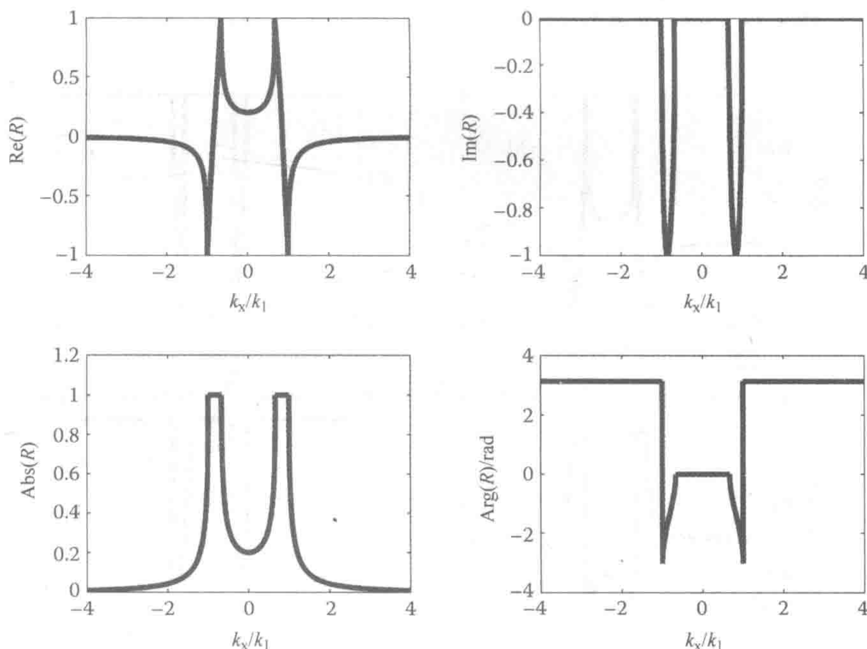


图 2.16　TE 极化波的反射系数与 k_x 之间的关系，$n_1=1.5$，$n_2=1.0$

的。图 2.17 和图 2.18 表示了 TM 极化波波矢量的 x 分量反射系数的关系。大体上它与 TE 极化波类似。唯一一点性质上的不同，在于当 $n_1>n_2$ 时，某一 k_x 值出现的零反射现象。这个 k_x 值对应的就是布儒斯特角。

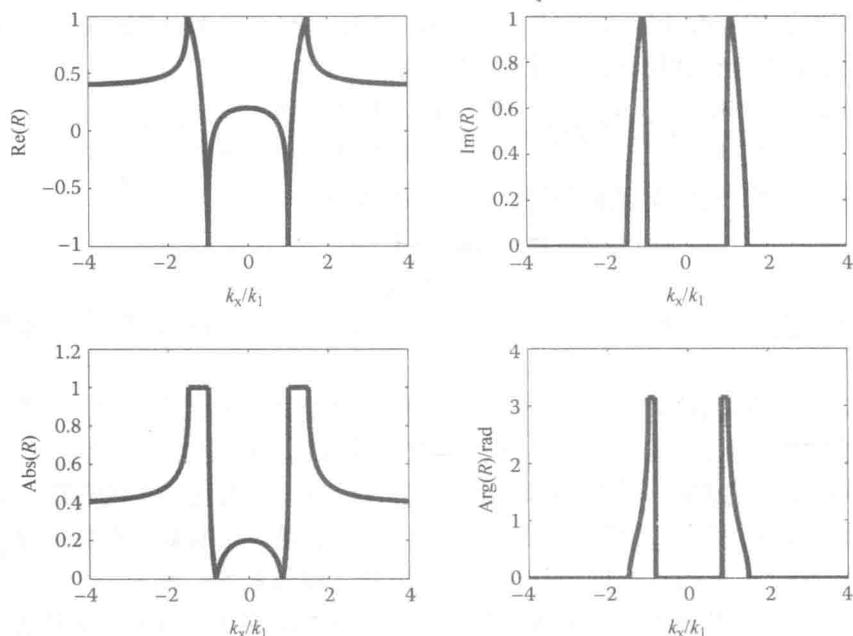


图 2.17 TM 极化波的反射系数 R 与 k_x 之间的关系，$n_1=1.0$，$n_2=1.5$

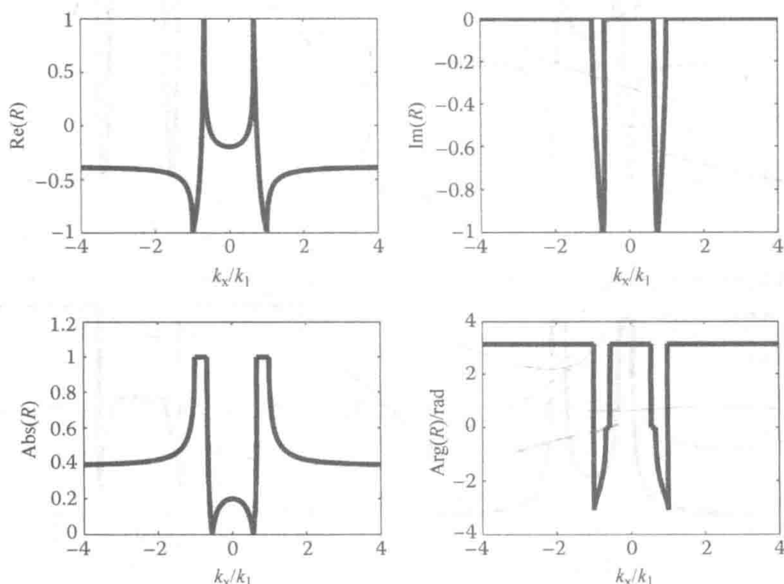


图 2.18 TM 极化波的反射系数 R 与 k_x 之间的关系，$n_1=1.5$，$n_2=1.0$

算法 2.2 总结了包含两个同性区的介质内光束传播的建模。

为了说明算法 2.2 的实现过程，我们考虑光束倾斜传播的情况。图 2.19 和图 2.20 为算法 2.2 计算出的 E_y 的绝对值分布。初始光束宽度（由式（2.10）定义且 $\tilde{U}=E_y$）为 30μm，倾角 $\theta=7.5°$。计算窗口为 600μm，样本数为 2^8。计算步长为 2μm，500 次迭代。图 2.19 中，$n_1=1.0$，$n_2=1.5$，图 2.20 中 $n_1=1.5$，$n_2=1.0$。两张图中，可以明显看出光折射改变了光束传播方向。不仅如此，图 2.20 还显示，透射波的幅度要大于入射波。这表明传统波动光学得出的结果违背了能量守恒定律。因此，在标量逼近中为了避免这个问题，应该对功率的反射系数取平方根而不是对场的反射系数取平方根。下面的例子中，涉及另一个标量近似带来的问题。图 2.21 所示为算法 2.2 计算的透射波 E_y 绝对值。初始光束宽度为 30μm，倾角 $\theta=45°$。计算窗口为 600μm，样本数为 2^{16}，$L_1=0$，$L_2=0.2$μm，$n_1=3.5$，$n_2=1.0$。计算场分布用 0.004μm 补偿迭代 50 次。入射角大于全反射极限角。但是，隐失波进入了介质 2。我们可以根据波印亭矢量计算出，这个隐失波在 z 方向不带有任何净功率。

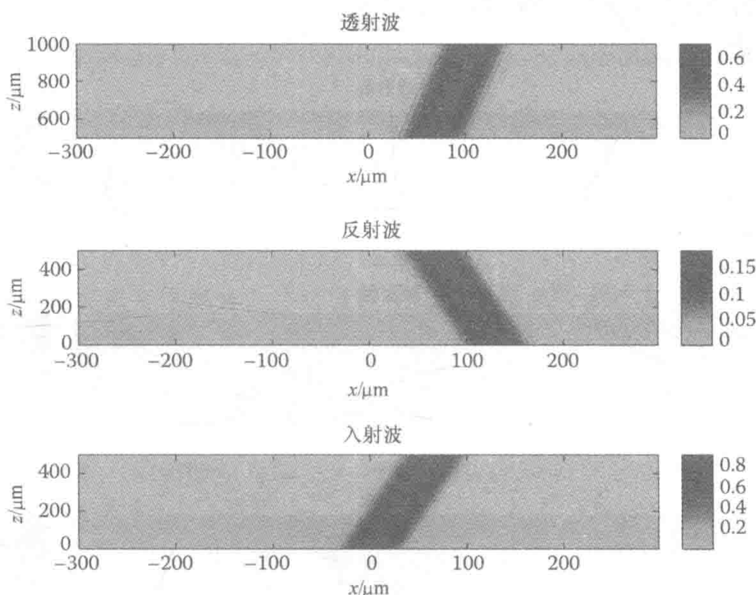


图 2.19　算法 2.2 计算得到的 y 电场分量绝对值分布，初始光束为 TE 极化波，宽度 30μm，倾角 $\theta=7.5°$，计算窗口为 600μm，样本数为 2^8，$L_1=L_2=500$μm，工作波长 1.06μm 的 $n_1=1.0$，$n_2=1.5$

算法 2.2 在两个同性区域构成的介质中波束平面传播的傅里叶方法

1. 开始;
2. 空间自由波长;
3. 从 2^N 中选出 N 个样本做 FFT;
4. 初始化 $z=-L_1$ 时，$\tilde{U}_i(x, -L_1)$;
5. 计算 FFT：$\tilde{U}(x, z)=Ae^{-jk_x x}e^{-jk_z z}$;
6. 计算 $\tilde{V}_i(k_x, 0)=\tilde{V}_i(k_x, -L_1)e^{jk_{1z}L_1}$;
7. 计算 $\tilde{V}_i(k_x, 0)=\tilde{V}_i(k_x, -L_1)e^{jk_{1z}L_1}$ 与 $\tilde{V}_r(k_x, 0)=R(k_x)\tilde{V}_i(k_x, 0)$;
8. 计算 $\tilde{V}_r(k_x, 0)=R(k_x)\tilde{V}_i(k_x, 0)$;
9. 计算 $\tilde{V}_t(k_x, L_2)=\tilde{V}_t(k_x, 0)e^{jk_{2z}L_2}$;
10. 计算 $\tilde{V}_r(k_x, -L_1)$的反 FFT 变换求 $\tilde{U}_r(x, -L_1)$;
11. 计算 $\tilde{V}_t(k_x, -L_2)$的反 FFT 变换求 $\tilde{U}_t(x, L_2)$;
12. 结束。

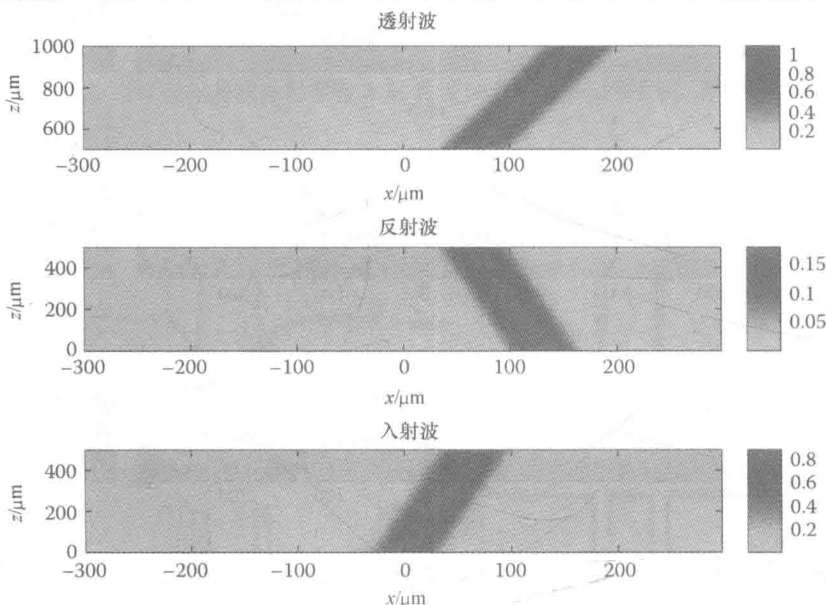


图 2.20 算法 2.2 计算得到的 y 电场分量绝对值分布，初始光束为 TE 极化波，宽度 30μm，倾角 $\theta=7.5°$，计算窗口为 600μm，样本数为 2^8，$L_1=L_2=500$μm，工作波长 1.06μm 的 $n_1=1.5$，$n_2=1.0$

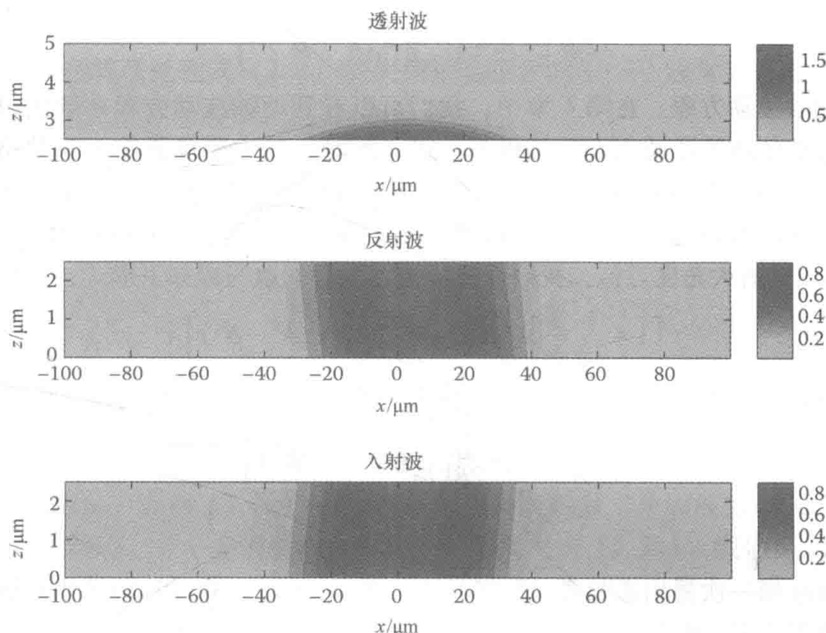


图 2.21　算法 2.2 计算得到的 y 电场分量绝对值分布，初始光束为 TE 极化波，宽度 30μm，倾角 $\theta=45°$，计算窗口为 600μm，样本数为 2^{11}，$L_1=L_2=2.5$μm，工作波长 1.06μm 的 $n_1=1.5$，$n_2=1.0$

2.3　近轴和大角度近似

近轴和大角度近似可以显著提高光束传播数值仿真的计算效率。两种近似都采用了提取波函数快速变化部分，并对缓慢变化的包络函数求解方程的方法。这种方法的优点源于采样缓慢变化的包络函数所需要的采样点，要比（快速变化的）波函数少。在本节中，我们将对波动方程（2.3）做近轴和大角度近似，并通过实例展示这种方法的长处和局限。

近轴近似的第一步是假设方程（2.3）的解，是缓慢变化的包络函数 $A(x, z)$ 与快速变化项的乘积：

$$\tilde{U}(x, z)=A(x, z)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\beta z} \tag{2.22}$$

式中，β 为任意一个常数，使 $A(x, z)$ 相对于变量 z 缓慢变化。将式（2.22）代入式（2.3）可得缓慢变化的包络函数方程：

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 A}{\partial z^2}+(k^2-\beta^2)A-2\mathrm{j}\beta\frac{\partial A}{\partial z}=0 \tag{2.23}$$

现在，考虑 $A(x, z)$ 是一个对变量 z 缓慢变化的函数（选择适当的 β），相比包含 z 的一阶导数项，可以忽略掉二阶导数。因而可得

$$2j\beta\frac{\partial A}{\partial z}=-\left[\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}+(k^2-\beta^2)A\right] \tag{2.24}$$

这就是近轴波动方程。在第 4 章中，我们可以看到近轴波动方程在解决很多问题时，要比数值求解波动方程简单很多。式（2.24）的主要局限在于它的精度可能无法满足有些应用的需要。因此，我们还需要对波动方程的大角度近似。大角度近似用于在保证近轴近似计算效率的同时，可以得到精度方面的提升。为了推导波动方程（2.3）的大角度近似，我们首先将式（2.23）改写成如下形式：

$$\left[1+\frac{j}{2\beta}\frac{\partial}{\partial z}\right]\frac{\partial}{\partial z}A=-\frac{j}{2\beta}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(k^2-\beta^2)\right]A \tag{2.25}$$

现在，为了得到方程（2.3）的大角度近似，我们将上式变为递归形式：

$$\left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_n=\frac{-\frac{j}{2\beta}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(k^2-\beta^2)\right]}{1+\frac{j}{2\beta}\left.\frac{\partial}{\partial z}\right|_{n-1}} \tag{2.26}$$

Hadley 第一次提出递归式（2.26）[13]。当 $n=1$ 时。式（2.26）中右侧分母中的偏导数等于零。因此，对 $n=1$，式（2.26）退化为近轴近似表达式（对比方程(2.23)）：

$$\frac{\partial}{\partial z}=-\frac{1}{2j\beta}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(k^2-\beta^2)\right] \tag{2.27a}$$

当 $n=2$ 时，我们有

$$\frac{\partial}{\partial z}=-\frac{-\frac{jP}{2\beta}}{1+\frac{P}{4\beta^2}} \tag{2.27b}$$

当 $n=3$ 时，我们有

$$\frac{\partial}{\partial z}=-\frac{-\frac{jP}{2\beta}-\frac{P^2}{8\beta^3}}{1+\frac{P}{2\beta^2}} \tag{2.27c}$$

当 $n=4$ 时，我们有

$$\frac{\partial}{\partial z}=-\frac{-\frac{jP}{2\beta}-\frac{jP^2}{4\beta^3}}{1+\frac{3P}{4\beta^2}+\frac{P^2}{16\beta^4}} \tag{2.27d}$$

其中，P 定义为

$$P=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+(k^2-\beta^2)$$

迭代式中 n 的值越大，大角度近似的阶数就越高。原则上，该递归过程可以一直进

行下去。但是，随着近似阶数增加，大角度近似的微分也变得越发复杂。所以，我们需要另外的算法处理式（2.3）的大角度近似。其中一个非常有效的方法[14]是对式（2.3）先进行因式分解：

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}+\mathrm{j}\sqrt{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+k^2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z}-\mathrm{j}\sqrt{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+k^2}\right)\tilde{U}=0 \tag{2.28}$$

故，当如下两式成立时，式（2.27）成立：

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}+\mathrm{j}\sqrt{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+k^2}\right)\tilde{U}=0 \tag{2.29a}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}-\mathrm{j}\sqrt{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+k^2}\right)\tilde{U}=0 \tag{2.29b}$$

式（2.29a）只表示沿着 z 轴正半轴的波，式（2.29b）只表示沿着 z 轴负半轴的波[15]。因此，方程（2.29）在一些文献中又被称为“单向波方程”。如果我们选择式（2.29a），并一直假设与时间相关，则代入式（2.22），我们可以得到下面的包络 A 方程：

$$\frac{\partial A}{\partial z}=\mathrm{j}\beta\left(1-\sqrt{1+\frac{P}{\beta^2}}\right)A \tag{2.30}$$

现在，我们引入平方根的帕德展开：

$$\sqrt{1+x}=1+\sum_{i=1}^{n}\frac{a_{i,n}x}{1+b_{i,n}x} \tag{2.31}$$

其中：

$$a_{i,n}=\frac{2}{2n+1}\sin^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right),\quad b_{i,n}=\cos^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right)$$

从而可得到式（2.3）的大角度近似：

$$\frac{\partial A}{\partial z}=-\mathrm{j}\beta\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{a_{i,n}\dfrac{P}{\beta^2}}{1+b_{i,n}\dfrac{P}{\beta^2}}\right) \tag{2.32}$$

式（2.32）中的展开系数是解析的，而且与式（2.26）不同，它不需要迭代。可以证明式（2.24）大角度近似的两种表达式（2.26）和式（2.32）实际上都基于平方根的帕德展开运算[13]。求解式（2.24）的大角度近似另外的方法包括泰勒逼近[16]和 Thiele 逼近[17]法。我们将在第4章中更详细地讨论它们。这里，我们只研究帕德展开式（2.32），因为该方法在开发研究光束传播的软件中更为常用。

首先，我们将式（2.4）带入式（2.32），得到大角度近似式（2.12）给出的 k_z 和 k_x 的近似关系：

$$k_z = \beta\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{a_{i,n}\dfrac{k^2-\beta^2-k_x^2}{\beta^2}}{1+b_{i,n}\dfrac{k^2-\beta^2-k_x^2}{\beta^2}}\right) \tag{2.33a}$$

按照相同的方法处理近轴近似，我们可得

$$k_z = \frac{1}{2\beta}(k^2-\beta^2-k_x^2) \tag{2.33b}$$

我们注意，因为在推导式（2.32）和近轴近似时，我们将快速变化相位因子 $\exp(-j\beta z)$提了出来，所以在直接和式（2.9）做比较之前，式（2.33）k_z 和 k_x 的关系需要先做 β 的相移。

在图 2.22 中，我们将式（2.33b）的近似结果与式（2.9）给出的 k_z 和 k_x 关系做出对比。我们假设 β 等于 k，并以 k 做归一化后画图。当 $k_x < k$ 时，对小传播角度的近似结果比较满意，但是随着离轴角度增大，近似的误差也逐渐增大。对 $k_x > k$，近轴算法得出的波矢量纵向分量值是错误的。这是因为，方程（2.9）将负实轴映射到虚轴上，而式（2.33b）却没有这一处理。式（2.9）和式（2.33b）这一本质上的区别表示，隐失波无法在近轴近似中精确地建模。在图 2.23 中，我们可以看到 k_z 和 k_x 的帕德（1，1）逼近关系。可以看出，对传播波的精度有了显著

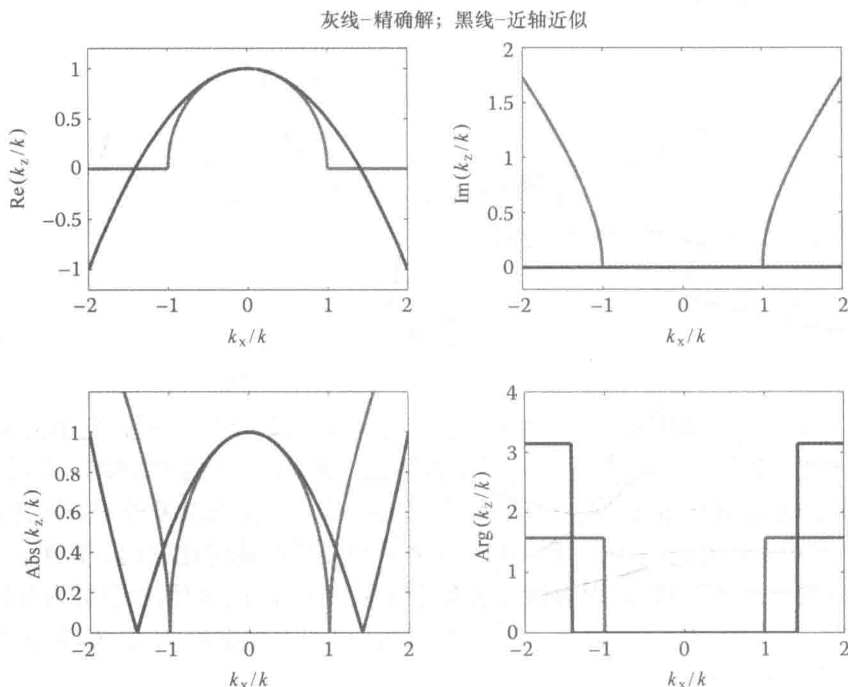


图 2.22 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.33b）］，参考传播常数等于介质波数 $k = nk_0$

的提升。提高帕德逼近的阶数可以更大幅度提高 $k_x < k$ 时的精度（如图 2.24 所示）。但是，对隐失模，帕德逼近同样存在与近轴近似相同的问题。即，帕德近似同样将负实轴映射到实轴，而并没有将其映射到虚轴上。将 β 取复数可以解决这个问题。图 2.25 表示了通过这一处理后 k_z 和 k_x 的关系。在本例中，β 的绝对值等于介质波数，而将 β 旋转到复平面[18]。图 2.25 中这一旋转角度定义为 $\pi/10$。当 β 为一个复数时，对传播波和隐失波，大角度近似帕德展开的精度都有提升。另一个我们可以发现的显著改进是，帕德展开近似重建了隐失模的特性。不仅如此，当 $k_x > k$ 时，通过增大旋转角，可以得到更高的精度（如图 2.26 所示）。见不过，在传播波的近似方面，失真有所恶化。实际上，波矢量垂直分量的虚部所造成的帕德逼近振荡现象会造成算法出现不稳定。这种振荡现象只能通过增加大角度近似阶数缓解（如图 2.27 所示）。如我们将在第 4 章中所述，增大大角度近似阶数会造成光束传播算法的每一步的计算开销增大。

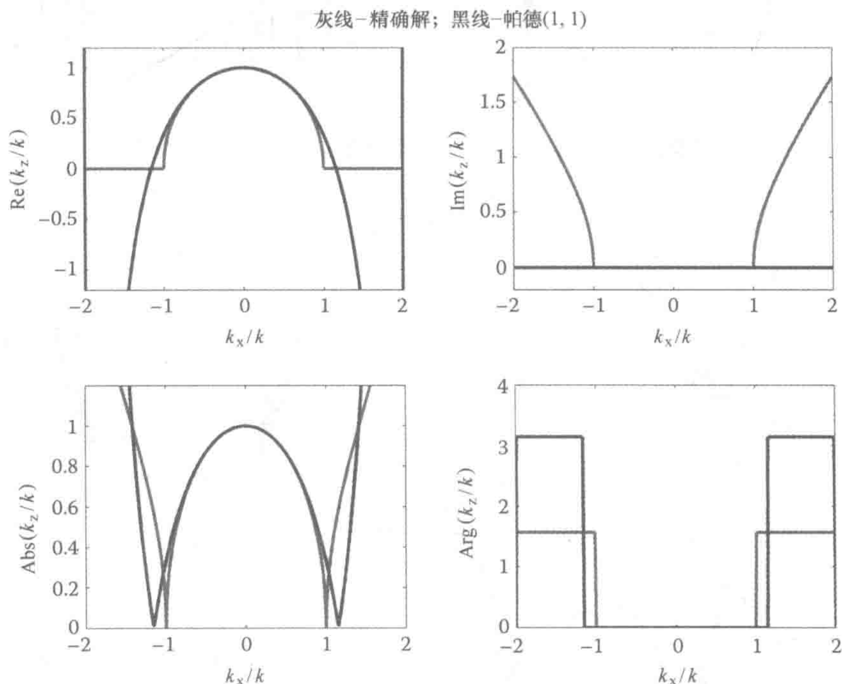


图 2.23　帕德（1，1）逼近得到的 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.32a）］；参考传播常数等于介质波数 $k = nk_0$

为了逐一解释用式（2.33）替代式（2.9）会出现的误差，我们首先以图 2.21 所示的光束传播为例，用算法 2.2 和帕德（1，1）逼近替代了式（2.9）。如我们预期，当参考传播常数与介质波数吻合时，帕德（1，1）逼近将隐失波作为传播

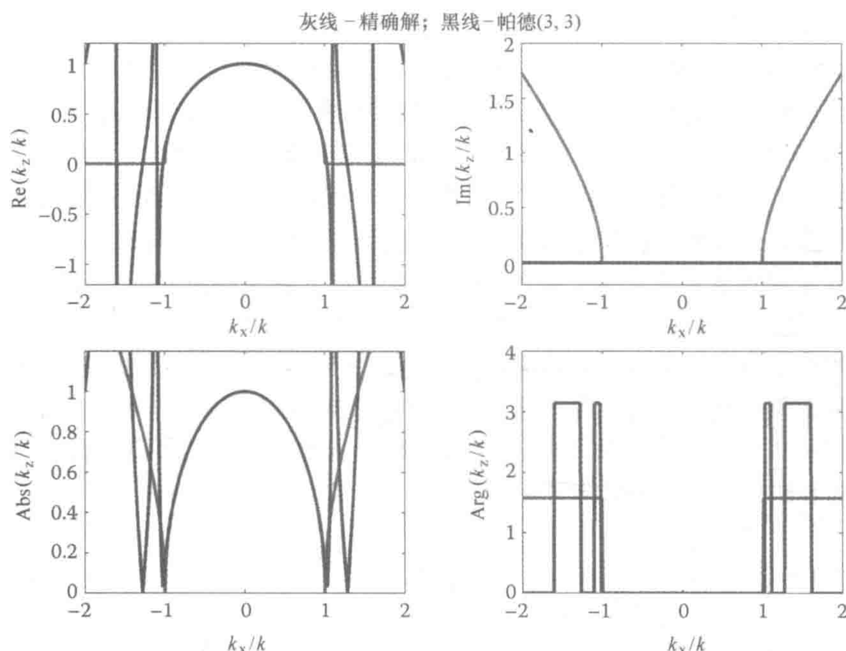


图 2.24 帕德（3，3）逼近得到的 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.33a）］。参考传播常数等于介质波数 $k=nk_0$

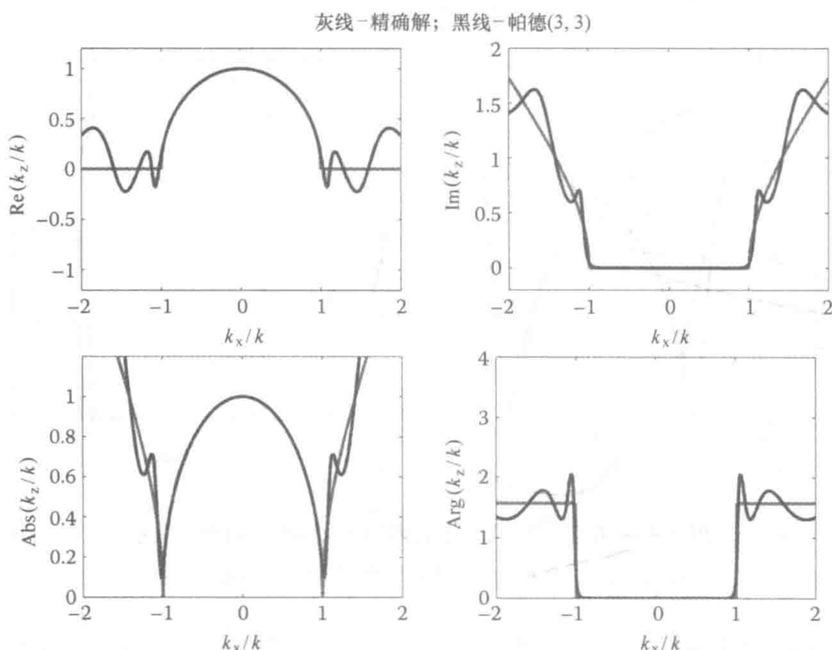


图 2.25 帕德（3，3）逼近得到的 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.33a）］，参考传播常数等于介质波数 $k=nk_0$，复平面内旋转角为 $\pi/10$

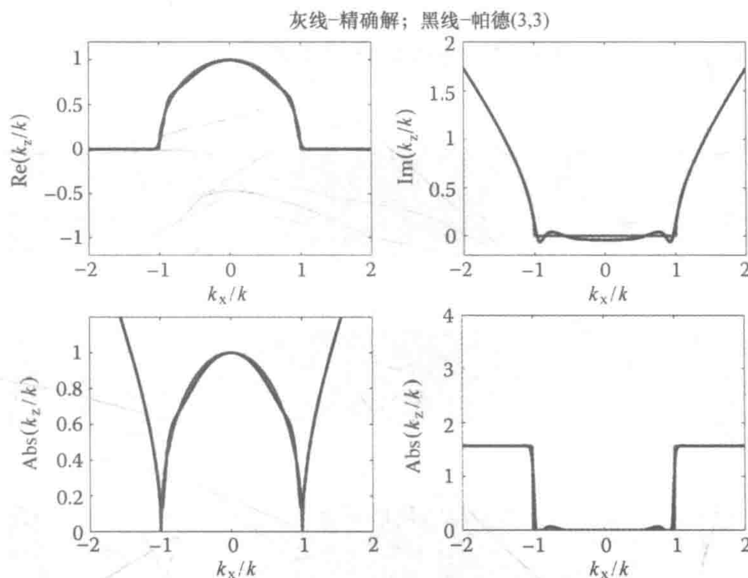


图 2.26　帕德（3，3）逼近得到的 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.33a）］，参考传播常数等于介质波数 $k=nk_0$。复平面内旋转角为 $\pi/3$

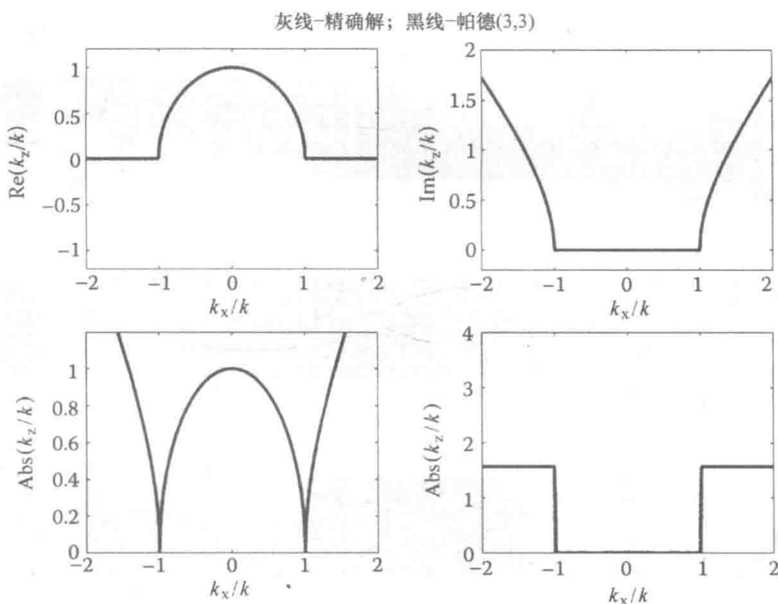


图 2.27　帕德（10，10）逼近得到的 k_z 和 k_x 的近似关系［按式（2.33a）］，参考传播常数等于介质波数 $k=nk_0$，复平面内旋转角为 $\pi/3$

波的一部分建模。但是，当在引入复平面旋转后，帕德逼近就可以正确地预测正确的隐失波现象了（如图 2.29 所示）。在实践应用中，经常需要同时考虑隐失模和

传输模。因此，较低阶数的帕德（1，1）逼近不足以满足应用。因为计算开销与逼近阶数密切相关，所以谨慎设计逼近运算器非常重要。我们将在第4章继续讨论这个问题。

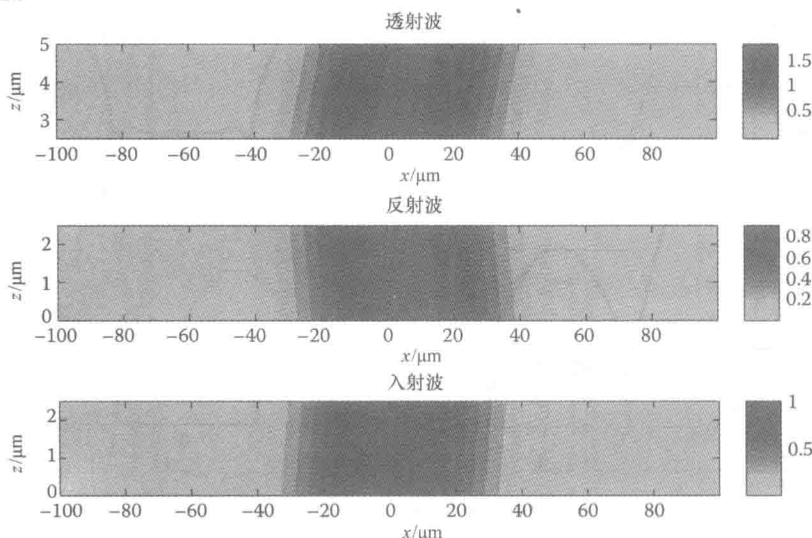


图2.28 帕德（1，1）逼近得到的y电场绝对值分布，参考传播常数等于每个介质的波数，初始光束是宽度等于30μm的TE极化波，倾角$\theta=45°$，计算窗口为200μm，样本数为2^{11}，$L_1=L_2=2.5\mu m$，$n_1=1.5$，$n_2=1.0$，工作波长为1.06μm

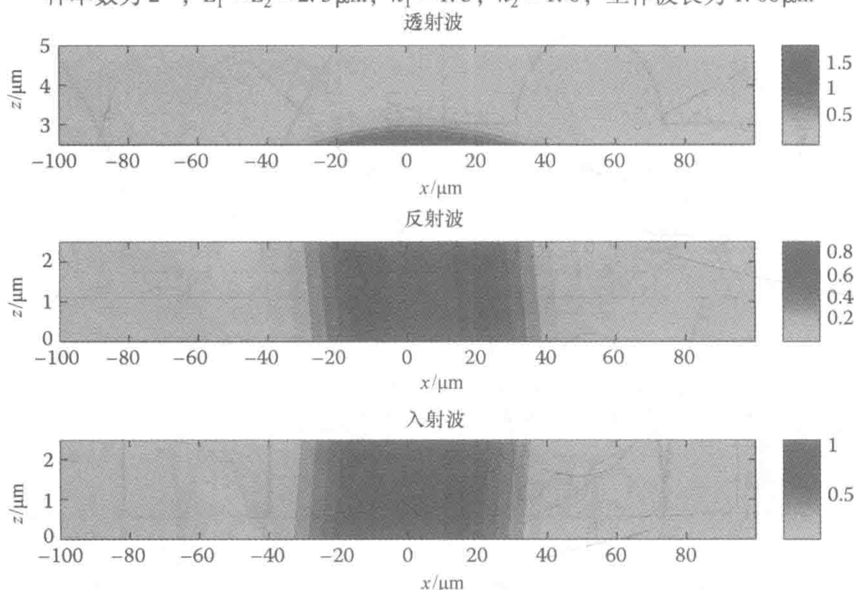


图2.29 帕德（1，1）逼近得到的y电场绝对值分布，参考传播常数等于折射率为n_1的介质波数，在其他介质中，参考传播常等于复平面旋转角度为$\pi/3$时，该介质的波数，初始光束是宽度等于30μm的TE极化波，倾角$\theta=45°$。计算窗口为200μm，样本数为2^{11}，$L_1=L_2=2.5\mu m$，$n_1=1.5$，$n_2=1.0$，工作波长为1.06μm

2.4 薄光学元件内的传输

在 2.2 节中，我们看到，通过分离所有复波幅度 $\tilde{U}(x, z)$ 的傅里叶分量，可以相对轻松地对两个同性介质交界处光束的传输和反射进行建模。傅里叶法的另一个应用是在近轴光束近似中。在这一实例中，我们定义复传输函数 $t(x, y) = \tilde{U}(x, z=0)/\tilde{U}(x, z=d)$。在近轴情况下，通过傅里叶算法，对一些薄体光学元件，用标量近似处理复传输或传送函数相对较为简单。例如，对厚度为 d 的透明平板，$t(x, y) = \exp(-\mathrm{j}nk_0 d)$[1]。我们还可以较直接地推导出其他体光学元件的复传输函数近似（见表 2.1）[1]。

表 2.1　体光器件的透射比

器件定义	透射比 $t(x)$
薄平板 x, n, 0, d, z	$\exp(-\mathrm{j}nk_0 d)$
棱镜 x, n, α, 0, d, z	$h_0 \exp(-\mathrm{j}(n-1)k_0 \alpha x)$ $h_0 = \exp(-\mathrm{j}k_0 d)$
半凸透镜 x, n, R, 0, d, d+t, z	$h_0 h_1 \exp\left(\mathrm{j}k_0 \dfrac{x^2}{2f}\right); h_0 = \exp(-\mathrm{j}nk_0 d)$; $h_1 = \exp(-\mathrm{j}nk_0 t); f = \dfrac{R}{n-1}$

（续）

器件定义	透射比 $t(x)$
半凹透镜	$h_0 h_1 \exp\left(jk_0 \frac{x^2}{2f}\right); h_0 = \exp(-jnk_0 d)$; $h_1 = \exp(-jnk_0 t)$; $f = -\frac{R}{n-1}$
正弦透射光栅	$h_0 \exp\left(-j\frac{1}{2}(n-1)k_0 d\cos(2\pi x/\Lambda)\right)$; $h_0 = \exp\left(-j\frac{1}{2}(n+1)k_0 d\right)$

为了展示传导函数概念的实用性，我们考虑一个光束通过 N－BK7 玻璃双凹透镜的实例。这样的双球透镜是由两个半球面连接在一起构成，所以它的传输函数可以表示成两个半球面传输函数的叠加。在计算中，我们假设每个半球面的参数如下：半径 $R=206.7\text{mm}$，$d=0.5\text{mm}$，$t=3\text{mm}$，工作波长为 $1.06\mu\text{m}$。由色迈耶尔色散公式：

$$n^2(\lambda)-1=\frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2-C_1}+\frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2-C_2}+\frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2-C_3} \tag{2.34}$$

可得该工作波长下的折射率为 1.50669。

从公司网页上查询 SCHOTT™ 的光学玻璃产品手册，可查询到 N－BK7 玻璃的系数，见表 2.2[19]。数值窗口宽度为 80mm。初始光束由三个光束宽度 $w=2\text{mm}$ 的高斯谱瓣构成，每个间隔 8mm［参考式（2.10）］。计算窗口为 80mm，样本数为 2^{16}，从 $z=0$ 到透镜的距离等于从透镜到计算窗口末尾的距离，等于 250mm。透镜材料为 N－BK7 玻璃，周围介质为空气，工作波长为 $1.06\mu\text{m}$。图 2.30 所示为标量近似 FFT 算法计算出的光强分布。按照表 2.1 计算光穿过透镜的传播。此外，我们用算法 2.1 计算。如我们预期，三个光束在通过透镜之后散开，虚焦点距离透镜中心约为 200mm。

表 2.2　N-BK7 玻璃的色迈耶尔系数

B_1	1.03961212
B_2	0.231792344
B_3	1.01046945
C_1	0.00600009867
C_2	0.0200179144
C_3	103.560653

来源：http://edit.schott.com/advanced_optics/english/abbe_data-sheets/schott_datasheet_n-bk7.pdf

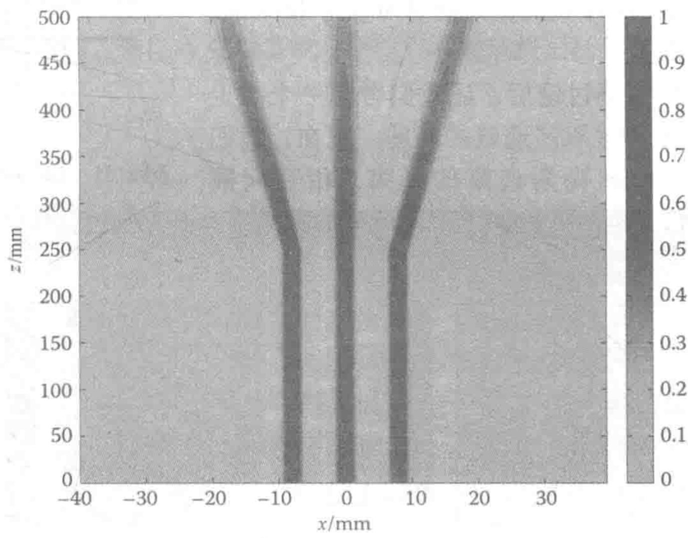


图 2.30　标量近似 FFT 算法得到的光强分布。初始光束由三个光束宽度 $w=2\text{mm}$ 的高斯谱瓣构成，每个间隔 8mm［参考式（2.10）］，计算窗口为 80mm，样本数为 2^{16}，从 $z=0$ 到透镜的距离等于从透镜到计算窗口末尾的距离，等于 250mm。透镜材料为 N-BK7 玻璃，周围介质为空气，工作波长为 1.06μm

在上一例中，我们忽略了光束在每个空气-玻璃界面都会发生反射的事实。这是使用表 2.1 中公式所致的一个缺陷。不过，在标量近似中，通过用在 $\theta=0$ 时功率反射和投射的平方根，可以较好地对电介质界面反射进行建模（参考“近轴和大角度近似”一节）。这样进行近似有些夸张，因为对近轴光线，反射和透射系数与传播角度无关（见图 2.15～图 2.18）。传输方程乘以投射系数也可以表示出菲涅尔损耗。最后一个有待解决的问题，是如何处理多重反射波的问题。解决这一问题的一个基本框架是使用 Bremmer 序列[20]。为了解释 Bremmer 序列的概念，让我们考虑一束波通过一组同性介质层的情况（如图 2.31 所示）. 从 $x=-\infty$ 入射的平面波在每一个界面都发生反射。在 Bremmer 序列方法中，通过每一层而不发生反射的波束成为主波束。在每一个折射率不同的交界面，主波束只乘以投射系数。第一阶

校正波由所有只在电介质层反射一次的波构成。二阶校正波由所有在电介质层反射两次的波构成。以此类推。Atkinson 在参考文献［21］中研究了 Bremmer 序列的收敛性。当 Bremmer 序列快速收敛时，只需要考虑几个校正波，在中等计算开销下就可得到精确的结果。在图 2.31 中，主波束 u_0 沿着 z 轴正半轴方向传播，校正波 u_1 沿着 z 轴负半轴方向传播。以上有关 Bremmer 序列的描述足够读者理解本节后面的部分。Bremmer 序列的正式推导可参考 Bremmer 的参考文献［20］。

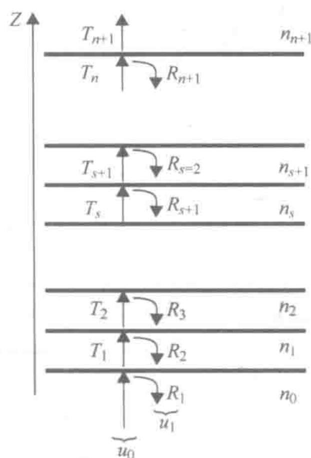


图 2.31　Bremmer 序列概念示意图

在进行一些铺垫讨论后，让我们考虑一个与上一例子类似的光通过双凹透镜的问题。现在，我们使用包含 3 个 4mm 高斯谱瓣的光束，相互间隔 8mm，他们通过三个间隔 8mm 宽 0.25mm 的宽光栅。

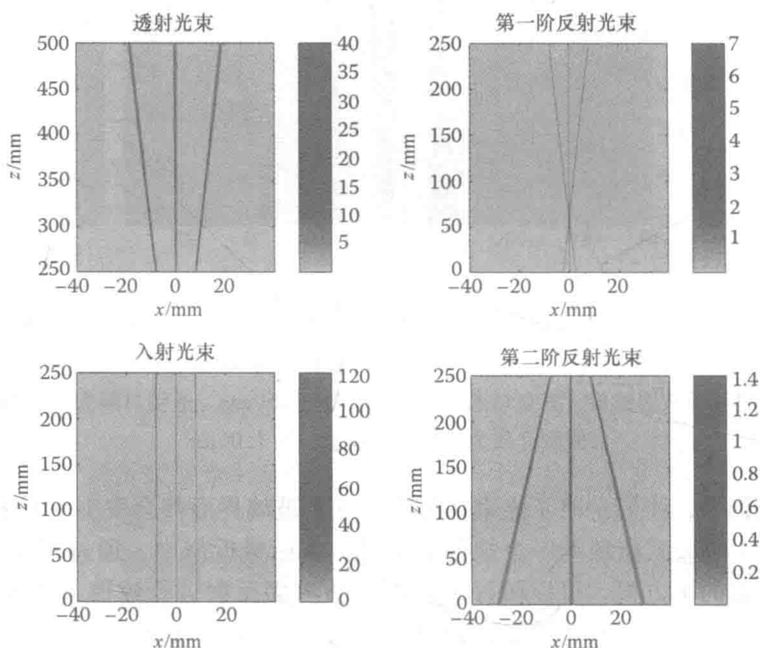


图 2.32　标量近似 FFT 算法得到的光强分布，包含 3 个 4mm 高斯谱瓣的光束，相互间隔 8mm，他们通过三个间隔 8mm 宽 0.25mm 的宽光栅。计算窗口为 80mm，样本数为 2^{16}，从 $z=0$ 到透镜的距离等于从透镜到计算窗口末尾的距离，等于 250mm。透镜材料为 N-BK7 玻璃，周围介质为空气。为了模拟实验中使用的非相干白光源，我们采用了 300～700nm 间隙为 5nm 的波长梳状滤波器，并对每个波长非相干的增加了光强

计算窗口为 80mm，样本数为 2^{16}，从 $z=0$ 到透镜的距离等于从透镜到计算窗口末尾的距离，等于 250mm。透镜材料为 N - BK7 玻璃，周围介质为空气。图 2.32 所示为入射波、透射波（两者构成了主 Bremmer 序列波束），以及两个构成一阶校正波的反射波的光强分布。在本例中，我们试图再现实验记录的光强分布图案（如图 2.33 所示）。为了模拟实验中使用的非相干白光源，我们采用了 300 ~ 700nm 间隙为 5nm 的波长梳状滤波器，并对每个波长非相干的增加了光强；即，我们加入了光强，而不是增加了标量位。

主 Bremmer 序列 u_0波束的计算相当于重新计算如图 2.30 所示的光强分布。但需要注意的是，在每个空气 - 玻璃界面，功率透射系数不等于 1。如早先所述，一阶校正波有两个分量，第一个分量是第一个空气 - 玻璃界面反射的。该分量的传输方程为

$$h_0\exp\left(-jk_0\frac{x^2}{f}\right), h_0=\exp(-jnk_0d), \text{其中} f=-\frac{R}{n-1}$$

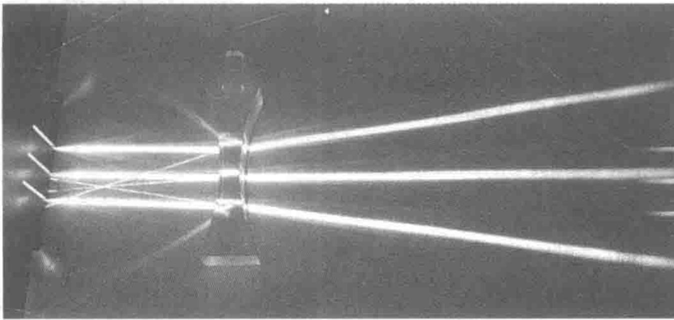


图 2.33　实验设置包括一个双凹透镜，三条入射光线
（图片源自维基百科“透镜”词条，版权归 2000，2001，2002 自由软件基金会有限公司所有，
51Franklin St，Fifth Floor，Boston，MA 02110 - 1301 USA）

一阶校正波 u_1的第二个分量是第二个空气 - 玻璃界面反射的。这个分量的传输方程等于主波束传输方程的平方。图 2.32 所示为所有三束光光强分布的计算结果。图 2.33 所示中可见的多个可见光束可以由 Bremmer 序列的更高阶项解释。第一阶校正波的第一分量在虚焦点处汇聚，而第二分量发散方向的反向延长线与透镜中心线的焦点，则位于透镜实际焦距的一半。更高阶的校正波比主波束和第一阶校正波弱很多，因此在实验中无法看到。在建模结果中，当计算连续反射和透射时，输入正确的透射和反射系数就可以看到这一效应。同时也印证了高阶校正波与主波束相比光强要弱很多的事实。

参考文献

1. Saleh, B.E.A. and M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics*. 1991, New York: John Wiley & Sons Inc.
2. Poon, T.-C. and T. Kim, *Engineering Optics with MATLAB*. 2006, London: World Scientific Publishing.
3. Born, M. and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. 1999, Cambridge: Cambridge University Press.
4. Solimeno, S., B. Crosignani, and P. Di Porto, *Guiding, Diffraction and Confinement of Optical Radiation*. 1986, London: Academic Press.
5. Felsen, L.B., and N. Marcuvitz, *Radiation and Scattering of Waves*. 1994, Oxford: Oxford University Press.
6. Press, W.H., S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. 2002, Cambridge: Cambridge University Press.
7. Debnath, L. and P. Miskusinski, *Introduction to Hilbert Spaces with Applications*. 2005, London: Elsevier.
8. Kreyszig, E., *Introductory Functional Analysis*. 1978, London: Wiley.
9. Sujecki, S., Arbitrary truncation order three-point finite difference method for optical waveguides with stepwise refractive index discontinuities. *Optics Letters*, 2010. 35(24): p. 4115–4117.
10. Iserles, A., *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. 2009, Cambridge: Cambridge University Press.
11. Hairer, E., C. Lubich, and G. Wanner, *Geometrical Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. 2002, Berlin: Springer.
12. Cheng, D.K., *Field and Wave Electromagnetics*. 1989, New York: Addison-Wesley.
13. Hadley, G.R., Wide angle beam propagation using Pade approximant operators. *Optics Letters*, 1992. 17(20): p. 1426–1428.
14. Anada, T., et al., Very-wide-angle beam propagation methods for integrated optical circuits. *IEICE Transactions on Electronics*, 1999. E82-C(7): p. 1154–1158.
15. Moore, T.G., et al., Theory and application of radiation boundary operators. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1988. 36(12): p. 1797–1812.
16. Schultz, D., C. Glingener, and E. Voges, Novel generalised finite difference beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1994. 30(4): p. 1132–1140.
17. Stralen, M.J.N.v., H. Blok, and M.V.d. Hoop, Design of sparse matrix representations for the propagator used in the BPM and directional wave field decomposition. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29(2): p. 179–197.
18. Rao, H., et al., Complex propagators for evanescent waves in bidirectional beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(8): p. 1155–1160.
19. Data sheet of SCHOTT N-BK7 glass, http://edit. schott.com/advanced_optics/english/abbe_datasheets/schott_datasheet_n-bk7.pdf
20. Bremmer, H., The W.K.B. approximation as the first term of a geometric-optical series. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1951. 4(1): p. 105–115.
21. Atkinson, F.V., Wave propagation and the Bremmer series. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 1960. 1(3–4): p. 225–276.

第3章　光　波　导

由光纤和平面技术（Planar Technolo）导引光波有众多应用。光纤是现代高速通信系统的中坚骨干。对出纤光功率不敏感的医疗和工业激光应用、高速计算机互联以及对现代传感器和测量系统减轻重量和提升抗外电场干扰性能而言，光纤同样也是必不可少的组成部分。另一方面，平面光波导，主要用于边发射激光器的光束形成。边发射激光器，在如现代传感器和测量系统中的传感器、光通信系统中的放大和高速外激光器二极管调制器中都有所应用。

当今，光纤技术所代表的低损耗光波导技术，可以实现各种波长和最大光功率的单模和多模光导引。光纤光学技术的高速发展，伴生了很多高质量光学器件。光纤技术的弱点在于器件体积较大，不适合低成本大批量生产。平面光波导技术，在另一方面，非常适合集成光学器件的低成本大批量生产，可以满足现代通信系统和其他应用的需求。

3.1　光波导理论简介

光波导，通常由在纵向超过100000倍光波长长度，而横向在纳米量级到100倍光波长长度之间的结构组成。光波导一般在沿着光传播方向上缓慢变化，而在其他方向上，通过电介质突变不连续性，截止光的传播。

对均值、线性的电介质，电场和磁场和磁通量的关系可由麦克斯韦方程组给出：

$$\nabla\times\vec{E}(\vec{r},t)=-\frac{\partial\vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t}\tag{3.1a}$$

$$\nabla\times\vec{H}(\vec{r},t)=\frac{\partial\vec{D}(\vec{r},t)}{\partial t}\tag{3.1b}$$

对未知场分布的傅里叶变换$\vec{X}(\vec{r},\omega)$，$=(\vec{E}(\vec{r},\omega),\vec{H}(\vec{r},\omega),\vec{D}(\vec{r},\omega),\vec{B}(\vec{r},\omega))$，定义为

$$\vec{X}(\vec{r},\omega)\doteq\int_{-\infty}^{\infty}\vec{X}(\vec{r},t)\exp(-\mathrm{j}\omega t)\,\mathrm{d}t$$

有

$$\nabla\times\vec{E}(\vec{r},\omega)=-\mathrm{j}\omega\vec{B}(\vec{r},\omega)\tag{3.1c}$$

$$\nabla\times\vec{H}(\vec{r},\omega)=\mathrm{j}\omega\vec{D}(\vec{r},\omega)\tag{3.1d}$$

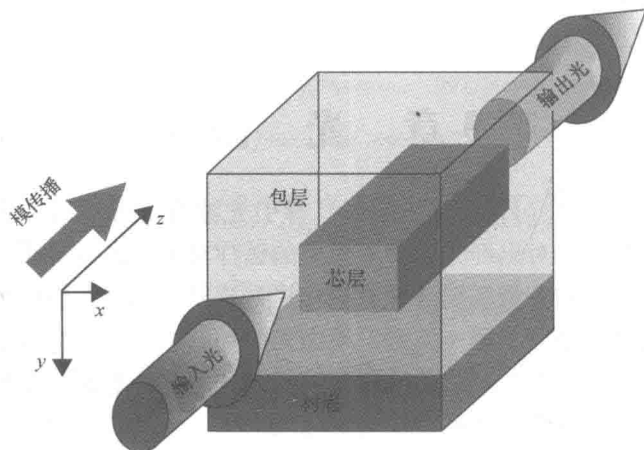


图 3.1　直角坐标系统下的光波导

其中角频率为 $\omega=2\pi ft$。我们接下来可以定义傅里叶反变换：

$$\vec{X}(\vec{r},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\vec{X}(\vec{r},\omega)\exp(j2\pi ft)\,df$$

方程（3.1）可添加（高斯定律）条件：

$$\nabla\cdot\vec{D}=0 \tag{3.2a}$$

$$\nabla\cdot\vec{B}=0 \tag{3.2b}$$

同时在频域和时域消除方程组（3.1）不符合实际情况的解。另外，电场和电通量向量间的关系可表示为

$$\vec{D}(\vec{r},t)=\varepsilon_0\int_{-\infty}^{\infty}(1+\chi^{(1)}(\vec{r},t-\tau))\vec{E}(\vec{r},\tau)\,d\tau \tag{3.3a}$$

在频域上可表示为

$$\vec{D}(\vec{r},\omega)=\varepsilon\vec{E}(\vec{r},\omega)=\varepsilon_0\varepsilon_r\vec{E}(\vec{r},\omega) \tag{3.3b}$$

式中，ε_0 为自由空间介电常数，ε_r 与 $\chi^{(1)}$ 在频域上的关系由下式表示：

$$\varepsilon_r(\vec{r},\omega)=1+\chi^{(1)}(\vec{r},\omega)$$

在光频段上，磁场和磁通量向量的频域和时域关系均可由下式表示：

$$\vec{B}=\mu_0\vec{H} \tag{3.3c}$$

式中，μ_0 为自由空间磁导率。由式（3.1）和式（3.3），可以得到波动方程组在频域上的表示：

$$\nabla\times\nabla\times\vec{E}=\mu_0\varepsilon\omega^2\vec{E} \tag{3.4a}$$

$$\varepsilon\nabla\times\left(\frac{1}{\varepsilon}\nabla\times\vec{H}\right)=\mu_0\varepsilon\omega^2\vec{H} \tag{3.4b}$$

通过与式（3.2a）和式（3.2b）联立，以及向量性质$\nabla\times\nabla\times\vec{E}=\nabla(\nabla\cdot\vec{E})-\nabla^2\vec{E}$，式（3.4a）可以变为

$$\nabla^2\vec{E}+\nabla\left(\frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon}\vec{E}\right)=-\mu_0\varepsilon\omega^2\vec{E} \tag{3.5a}$$

通过与式（3.2a）和式（3.2b）联立，以及向量性质$\nabla\times\nabla\times\vec{H}=\nabla(\nabla\cdot\vec{H})-\nabla^2\vec{H}$和$\nabla\times(1/\varepsilon\nabla\times\vec{H})=\nabla(1/\varepsilon)\times\vec{H}+(1/\varepsilon)\nabla\times\nabla\times\vec{H}$，式（3.4b）可以变为

$$\nabla^2\vec{H}+\frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon}\times(\nabla\times\vec{H})=-\mu_0\varepsilon\omega^2\vec{H} \tag{3.5b}$$

电场和磁场向量波动方程（3.4）和（3.5）并不是联立的。所以，在光波导分析中，我们只需求解其中一个方程。余下的电磁场项可由式（3.1）解出。电场向量表达式将放在研究非线性现象时再进行研究，这是因为非线性现象一般都可由电场向量表示（见第9章）。研究磁场通常要比研究电场方便，可以得出更高效和精确的算法。求解方程（3.4）与求解方程（3.5）不同，它不需要满足方程（3.2）的零散度条件。因此，方程（3.4）会存在有物理意义的解和无物理意义的伪解。

对在波长尺度上变化缓慢的结构ε，向量波动方程（3.5）可以用标量波动方程近似：

$$\nabla^2\Phi=-\mu_0\varepsilon\omega^2\Phi \tag{3.6}$$

式中，Φ是标量位势。因为在推导方程（3.6）时使用了零散度条件，所以与方程（3.5）类似，求解方程（3.6）也需要满足该条件。

光波导内的电磁场分布可由方程（3.1）、方程（3.4）、方程（3.5）或方程（3.6）（标量近似下）直接解出。为此，我们可以使用基于数值方法的有限差分、有限元，或边界元求解方程。这些方法可以在所求区域内，根据激励源分布和边界条件计算场分布。因为平面光波导与工作波长相比要大很多，所以数值计算通常会需要非常大的计算资源。因此，我们采用一种不同的方法计算。该方法假设，光波导是完全笔直的，且无限长。所以，如果我们将波导沿z轴放置时，ε与z无关，方程（3.5a）在频域的解可以表示为两个函数的乘积：

$$\vec{E}(\vec{r},\omega)=E(x,y,\omega)\exp(-j\beta z) \tag{3.7}$$

将方程（3.7）带入方程（3.5a）中，且ε与z无关，则有

$$\nabla\varepsilon=\vec{i}_x\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}+\vec{i}_y\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}$$

对向量$E(x,y,\omega)=\vec{i}_xE_x(x,y,\omega)+\vec{i}_yE_y(x,y,\omega)+\vec{i}_zE_z(x,y,\omega)$，可得如下方程：

$$\frac{\partial^2E_x}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_x)}{\partial x}\right)+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)E_x+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_y)}{\partial y}\right)-\frac{\partial^2E_y}{\partial x\partial y}=0 \tag{3.8a}$$

$$\frac{\partial^2E_y}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_y)}{\partial y}\right)+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)E_y+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_x)}{\partial x}\right)-\frac{\partial^2E_x}{\partial y\partial x}=0 \tag{3.8b}$$

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2}+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)E_z-j\beta\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial x}E_x+\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial y}E_y\right)=0 \tag{3.8c}$$

与此类似，将$\vec{H}(\vec{r},\ \omega)=H(x,\ y,\ \omega)\exp(-j\beta z)$代入式（3.5b）中，对向量$H(x,\ y,\ \omega)=\vec{i}_x H_x(x,\ y,\ \omega)+\vec{i}_y H_y(x,\ y,\ \omega)+\vec{i}_z H_z(x,\ y,\ \omega)$，我们可得到：

$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial x^2}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_x}{\partial y}\right)+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)H_x-\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_y}{\partial x}\right)+\frac{\partial^2 H_y}{\partial y\partial x}=0 \tag{3.8d}$$

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial y^2}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_y}{\partial x}\right)+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)H_y-\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_x}{\partial y}\right)+\frac{\partial^2 H_x}{\partial x\partial y}=0 \tag{3.8e}$$

$$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_z}{\partial x}\right)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial H_z}{\partial y}\right)+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)H_z-j\beta\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}H_x+\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}H_y\right)=0 \tag{3.8f}$$

方程（3.6）和方程（3.7）可以用矩阵形式简洁的表示：

$$\left(\begin{bmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}\end{bmatrix}+\omega^2\mu_0\varepsilon\right)\begin{bmatrix}E_x\\E_y\\E_z\end{bmatrix}=\beta^2\begin{bmatrix}E_x\\E_y\\E_z\end{bmatrix} \tag{3.9a}$$

$$\left(\begin{bmatrix}b_{11}&b_{12}&b_{13}\\b_{21}&b_{22}&b_{23}\\b_{31}&b_{32}&b_{33}\end{bmatrix}+\omega^2\mu_0\varepsilon\right)\begin{bmatrix}H_x\\H_y\\H_z\end{bmatrix}=\beta^2\begin{bmatrix}H_x\\H_y\\H_z\end{bmatrix} \tag{3.9b}$$

其中，矩阵a_{ij}和b_{ij}的元素分别见表3.1和表3.2。表中“◦”为“占位符”符号，它表示前面的算符作用于函数。

表3.1 元素a_{ji}

$a_{j,i}$	$i=1$	$i=2$	$i=3$
$j=1$	$\frac{\partial^2\circ}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon\circ)}{\partial x}\right)$	$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon\circ)}{\partial y}\right)-\frac{\partial^2\circ}{\partial x\partial y}$	0
$j=2$	$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon\circ)}{\partial x}\right)-\frac{\partial^2\circ}{\partial y\partial x}$	$\frac{\partial^2\circ}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon\circ)}{\partial y}\right)$	0
$j=3$	$-j\beta\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\circ$	$-j\beta\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\circ$	$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}$

表3.2 元素b_{ji}

$b_{j,i}$	$i=1$	$i=2$	$i=3$
$j=1$	$\frac{\partial^2\circ}{\partial x^2}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial y}\right)$	$-\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial x}\right)+\frac{\partial^2\circ}{\partial y\partial x}$	0
$j=2$	$-\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial y}\right)+\frac{\partial^2\circ}{\partial x\partial y}$	$\frac{\partial^2\circ}{\partial y^2}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial x}\right)$	0
$j=3$	$-j\beta\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\circ$	$-j\beta\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\circ$	$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial x}\right)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial\circ}{\partial y}\right)$

在式（3.9）中，a_{13}，a_{23}，b_{13}和b_{23}等于零。因此，横向场分量和纵向场分量不共轭，我们可以只求解一组横向场的波动方程：

$$\left(\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} + \omega^2\mu_0\varepsilon\right)\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \beta^2\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \tag{3.10a}$$

$$\left(\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} + \omega^2\mu_0\varepsilon\right)\begin{bmatrix} H_x \\ H_y \end{bmatrix} = \beta^2\begin{bmatrix} H_x \\ H_y \end{bmatrix} \tag{3.10b}$$

如果方程（3.10a）可解，则可以根据3.2a计算出E_z分量：

$$E_z = -\frac{1}{j\beta\varepsilon}\left(\frac{\partial(\varepsilon E_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon E_y)}{\partial y}\right) \tag{3.11a}$$

磁场分量可由下式得到

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} + j\beta E_y = -j\omega\mu_0 H_x \tag{3.11b}$$

$$-\frac{\partial E_z}{\partial x} - j\beta E_x = -j\omega\mu_0 H_y \tag{3.11c}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_z \tag{3.11d}$$

另一种途径，如果方程（3.10b）可解，则可根据方程（3.2b）计算出H_z分量：

$$H_z = -\frac{1}{j\beta}\left(\frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y}\right) \tag{3.11e}$$

电场分量可由下式得到

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} + j\beta H_y = j\omega\varepsilon E_x \tag{3.11f}$$

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} - j\beta H_x = j\omega\varepsilon E_y \tag{3.11g}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega\varepsilon E_z \tag{3.11h}$$

再一次用矩阵形式表示方程（3.10），它可以如下表示，以方便随后的推导：

$$(A + \omega^2\mu_0\varepsilon)E_t = \beta^2 E_t \tag{3.12a}$$

$$(B + \omega^2\mu_0\varepsilon)H_t = \beta^2 H_t \tag{3.12b}$$

式中，E_t和H_t分别是电场和磁场的横向（垂直于z）分量。矩阵A和B为

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},\ B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \tag{3.13}$$

式中，元素a_{ji}和b_{ji}见表3.1和表3.2。

向量方程（3.12）相对较难求解。不过，对于存在极化模的导引结构，方程可显著地进行化简。这样的结构可导引两种模，即沿着x方向的极化模（x极化，

类 TE 模），和沿着 y 方向的极化模（y 极化，类 TM 模）。x 极化模的电磁场横向分量主要是 E_x 和 H_y，而 y 极化模则是：E_y 和 H_x。极化近似是平面光波导建模的一种非常成功的方法，所以在实践中非常重要[1]。对 x 极化模，当忽略次要的场分量后，方程（3.12）可化简为

$$(a_{11}+\omega^2\mu_0\varepsilon)E_x=\beta^2E_x \tag{3.14a}$$

和

$$(b_{22}+\omega^2\mu_0\varepsilon)H_y=\beta^2H_y \tag{3.14b}$$

对 y 极化模，则有如下方程式：

$$(a_{22}+\omega^2\mu_0\varepsilon)E_y=\beta^2E_y \tag{3.14c}$$

和

$$(b_{11}+\omega^2\mu_0\varepsilon)H_x=\beta^2H_x \tag{3.14d}$$

与方程（3.12）不同，电场和磁场的纵向分量在极化近似情况下不共轭。所以，我们可以独立求解它们，从而减少了所需计算开销。文献发表的数值结果显示，分别求解电场和磁场所得相应的传播常数相等[1]。理论上，方程（3.14a）、方程（3.14c）和方程（3.14b）、方程（3.14d）互为伴随方程可以解释这一结论。

如果在横向平面变化缓慢，则可以使用标量近似。将 $\Phi(\vec{r},\omega)=\phi(x,y,\omega)\exp(-\mathrm{j}\beta z)$代入方程(3.6)可得

$$(s+\omega^2\mu_0\varepsilon)\phi=\beta^2\phi \tag{3.15}$$

其中 s 为

$$s=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2} \tag{3.16}$$

方程(3.12)~方程(3.15)为光波导理论的基础。除了一部分简单的波导结构以外，这些方程无法得到分析解。当研究光在光纤的传播时，为了方便起见，会将方程（3.12）和方程（3.16）转换为柱坐标形式。这一部分将在“光纤”小节中详细讨论。

最后，我们考虑模的正交。让我们考虑麦克斯韦方程组的两个解，它们分别用角标“1”和“2”标注。模正交条件可由麦克斯韦方程结合洛仑兹互易定理得出[2]：

$$\nabla\cdot(\vec{E}_1\times\vec{H}_2^*+\vec{E}_2^*\times\vec{H}_1)=0 \tag{3.17}$$

由式（3.17），结合式（3.12）两个本征模相应的场分布，有

$$\vec{E}_1=(\vec{E}_{tm}+\vec{E}_{zm})e^{j(\omega t-\beta_m z)}$$

$$\vec{H}_1=(\vec{H}_{tm}+\vec{H}_{zm})e^{j(\omega t-\beta_m z)}$$

$$\vec{E}_2=(\vec{E}_{tp}+\vec{E}_{zp})e^{j(\omega t-\beta_p z)}$$

$$\vec{H}_2=(\vec{H}_{tp}+\vec{H}_{zp})e^{j(\omega t-\beta_p z)}$$

式中，下角标“t”表示向量的横向部分；下角标“z”表示纵向部分，它有 m 和 p

两种角标以表示模。由散度定理[2,3]，在全横平面 S 内求积分，有

$$(\beta_m - \beta_p)\iint_S (\vec{E}_{tm} \times \vec{H}_{tp}^* + \vec{E}_{tp}^* \times \vec{H}_{tm})\,dxdy = 0 \tag{3.18}$$

所以，若 $\beta_m \neq \beta_p$，则必有

$$\iint_S (\vec{E}_{tm} \times \vec{H}_{tp}^* + \vec{E}_{tp}^* \times \vec{H}_{tm})\,dxdy = 0 \tag{3.19}$$

这就是方程（3.12）中两个本征值 β_m 和 β_{p*} 所对应的本征模的正交条件。

我们可以看到，传播常数的平方等于方程（3.12）的一个本征值。这意味着方程（3.12）的两个本征值都是传播常数可能的取值——它们一个带正号，一个带负号。正号对应了沿着 z 正半轴方向的传播模，而负号对应了负半轴方向的传播模。通过我们求解方程（3.12a）或是方程（3.12b），我们都可以看到，两个模有相同的横向电场或磁场分布。不过，由式（3.11）得到的其他电磁场向量分量会随着模传播方向的符号取值不同而不同。在电磁场中，传播模的分布只有一个方向，故式（3.10）化简为[2]：

$$\iint_S (\vec{E}_{tm} \times \vec{H}_{tp}^*)\,dxdy = 0 \tag{3.20}$$

推导式（3.19）的过程中还会产生一个问题，即函数应用散度定理不需要连续可微向量场。但应该注意的是，正交条件需要一个内积空间才成立。我们一般不需要推导内积的定义。我们一般假设一个空间，并按内积定义验证是否满足正交条件[4,5]。如果 $\beta_m = \beta_p = \beta_{mp}$，则根据波印亭定理，有

$$\iint_S (\vec{E}_{tmp} \times \vec{H}_{tmp}^* + \vec{E}_{tmp}^* \times \vec{H}_{tmp})\,dxdy = 4\iint_S S_z\,dxdy \tag{3.21}$$

式中，S_z 代表了时均波印亭矢量的纵向分量。因此，如果这个正交系统是右手系，则式（3.21）为正，所以式（3.19）是正定的。我们同样可以得到其线性和共轭对称性质。所以式（3.19）定义了一个内积空间。

最后，为了供以后使用，我们将波导模的电磁场分量的波印亭矢量纵向分量单独写出：

$$S_z = \frac{1}{4}(E_x H_y^* - E_y H_x^* + E_x^* H_y - E_y^* H_x) \tag{3.22}$$

表 3.3 经典和量子理论的功率流测量

Classical 经典理论		
标量和极化进似	标量	量子理论
功率密度	光强	光子通量密度
$S_z = \frac{1}{4}(E_x H_y^* - E_y H_x^* + E_x^* H_y - E_y^* H_x)$	$I = \Phi^* \Phi$	$\frac{I}{H\nu}$; $\frac{S_z}{h\nu}$
功率	功率	光子适量
$P = \iint_S S_z\,dxdy$	$P = \iint_S I\,dxdy$	$\frac{P}{h\nu}$

当由式（3.12）解出 E_x 和 E_y 或 H_x 和 H_y 后，其他两个横向场分量可由式（3.11）自洽求解得到。

式（3.19）和式（3.22）同样对式（3.14）得到的极化模情况适用。在标量化情况中，对于标量积

$$\langle \varphi_m, \varphi_p \rangle = \iint_S \varphi_m^* \varphi_p \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{3.23}$$

如果算子 $s+\omega^2\mu\varepsilon$ 是自伴的，则可得到模的正交性。

如果 $m=p$，则由式（3.23），以及式（3.15）解出的 mp 模标量位 φ，可得到 mp 模的光强：

$$I_{mp} = \varphi_{mp}^* \varphi_{mp} \tag{3.24}$$

在表 3.3 中，总结了功率测量、对方程（3.12）矢量解的功率通量、极化近似式（3.14），标量近似式（3.15），以及量子理论的等效近似，以供第 7 ~ 9 章内容的需要。

本章余下的部分将分为两个部分。首先，我们将对平面技术制造的光波导进行分析和建模。然后将研究光纤的理论和建模技术。

3.2　平面光波导

在本节中，我们首先讨论一些在集成光学和平面光子器件中常见的光波导。随后，我们将讨论理论和数值方法，以用于模场分布和传播常数的计算。我们将用 MATLAB 写一些简单的程序实例，验证理论应用的结果。

3.2.1　平面光波导中的导引

所有的集成光路功能组件，都使用光波导以实现在纵平面内的光场约束。因而，光子器件设计需要在由制造技术和器件应用所决定的参数空间内，选择特定的光波导，满足设计指标。平面光波导内的光导引有三种导引机制：

- 折射率导引；
- 低损耗泄漏光导引；
- 增益导引。

折射率导引结构基于全反射原理工作。因此，该结构芯区的折射率要大于包层和衬底层的折射率。因而这种结构在可用材料的选择和制造工艺上存在限制。滴损耗泄漏光导引可以克服这一限制。增益导引只用于激光器二极管。

折射率导引平面光波导

以下为一些在集成光学中基本的折射率导引平面光波导结构：

- 平板（slab）波导（如图 3.2 所示）
- 长方形（rectangular）波导（如图 3.3 所示）

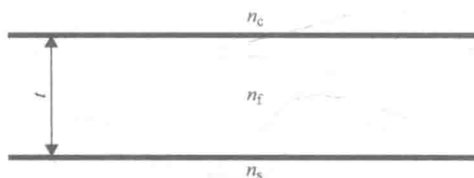


图3.2 平板波导

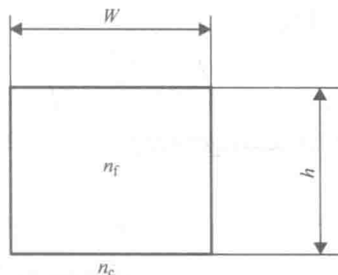


图3.3 长方形波导

- 脊形（rib）波导（如图3.4所示）

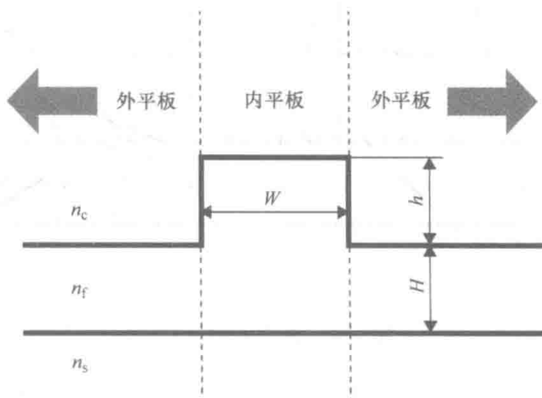


图3.4 脊形波导

- 脊形波导管（ridge）（如图3.5所示，它只是脊形波导当$H=0$的特殊情况）
- 脊形夹层（rib - loaded）波导（如图3.6所示）
- 内扩散（in - diffused）波导（如图3.7所示）

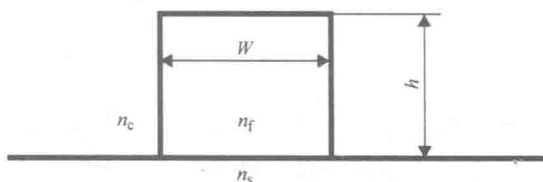


图3.5 脊形波导管

最简单的波导结构，是平面技术最简单的应用，即平板波导（见图3.2）。平板波导包括一个厚度为t、折射率为n_f的芯层，以及折射率分别为n_c和n_s的包层区和衬底区。为了实现折射率导引，芯层的折射率必须大于衬底和包层的折射率，即$n_f > \max(n_s, n_c)$。一个平板波导可导引两种模：横电模（TE）和横磁模（TM）。两种模只有三个电磁场分量。如果平板波导是对称的，即$n_s = n_c$，则它至少可以导引一个给定波长的一个模。此外，若$n_s > n_c$，则：

$t\dfrac{2\pi}{\lambda}\sqrt{n_f^2 - n_s^2} < \sqrt{A}$其中对TE模有$A = \dfrac{n_s^2 - n_c^2}{n_f^2 - n_s^2}$

对 TM 模，有

$$A=\frac{n_f^2}{n_c^4}\frac{n_s^2-n_c^2}{n_f^2-n_s^2},$$

则它无法导引任何模[3]。

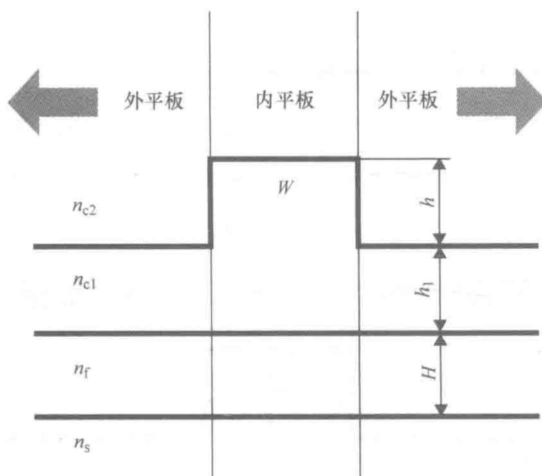


图 3.6 脊形夹层波导



图 3.7 内扩散波导

在集成光路中应用平板波导有一个主要难题：平板波导无法在横向对光进行约束。一个平板波导可以在衬底和包层中间加入更多层。这样的结构通常称为多层平板波导。这种平板波导在理论层面非常重要，因为只需要按照平面光波导结构对它进行分析。

长方形电介质波导（见图 3.3）是一种平面波导的最简单结构，它可以实现光的垂直和横向约束。光束在折射率为 n_f 的芯区导引，其折射率大于包层 n_c。对边长为 w 的正方形波导，单模条件近似为 $w*(4\pi/\lambda)*\sqrt{n_f^2-n_c^2}<2$[6]，其中 λ 为工作波长。单模条件随长宽比 w/h 变化。对大长宽比 w/h，长方形波导的单模条件可近似为厚度为 h 的平板波导的单模条件，即 $h*(2\pi/\lambda)*\sqrt{n_f^2-n_c^2}<\pi/2$[7]。因为单模条件包含了波导尺寸和对比折射率的乘积，所以很难设计一个既有较大横截面，又满足较大芯层 - 包层折射率比的单模长方形波导。因此，单模光纤和大折射率比长方形波导的高效率耦合，也就较难实现。对长方形波导模一般性质的深入研

究请参考 Majewski 和 Sujecki[6,9]以及 Goell[8]的相关文章。

使用脊形波导结构，可以实现大横截面积和大芯层－包层折射率比的电介质材料单模平板光波导。脊形波导最初由 Goell 提出用于减小定向耦合器的制造容差[10]。图 3.4 所示为脊形光波导的横截面示意图。脊形波导的脊形部分折射率为 n_f，衬底折射率为 n_s，包层部分折射率为 n_c。H 为外层平板厚度，h 为脊高，w 为脊宽。在垂直点划线表示的部分之间和点划线外侧的部分分别称为内平板和外平板区。芯层的折射率大于衬底和包层的折射率，即$n_f > \max(n_s, n_c)$，以保证垂直方向的折射率导引。而内平板的高度大于外平板的高度，以保证平行方向的折射率导引（请参考 Ebeling[3]的例子）

在文献中还定义了一种特殊的脊形波导，即大脊形波导。一个大脊形波导满足如下条件[11]：

$$((H + h)/\lambda) * \sqrt{n_f^2 - n_s^2} > 1$$

大脊形波导可以实现大横截面积和大芯层－包层折射率比的单模结构。这是因为这种结构的可导引模数量取决于 $h/(h+H)$ 和 $w/(h+H)$ 的比值[11,12]。Soref 等人[11]和 Marcatili[12]修正了单模大脊形波导简单的分析设计公式，Dagli 和 Fonstad[13]、Pogossian 等人[14]和 Powell[15]，以及 Lousteau 等人[16]的研究中采用了更精确的数值和经验方法。对脊形光波导一般性质的详细研究，请参考 Majewski 和 Sujecki[17,18]，以及 Chiang 和 Wong[19]的文献。

脊形波导管是一种特殊的脊形波导，它也可以理解为是一种广义的长方形波导。脊形波导管有与长方形波导类似的单模性质。根据有效折射率分析，它的单模导引横截面要比长方形波导略大[3]。不过，它的基模截至波长不等于零。

在制造工艺上，脊形夹层波导（见图 3.6）由穿过芯层导引区的外部刻蚀制成（非常重要的工艺，例如用于半导体激光二极管制造）。它的芯层厚度为 H、折射率为 n_f，衬底折射率为 n_s。芯层外面是折射率为 n_{c1} 的脊形波导，以实现横向导引。在脊形波导外面是折射率为 n_{c2} 的另一层包层（通常为空气或金属接触）。脊形夹层波导的一个缺陷，是基模光束形状有较大的长宽比，从而较难实现与单模光纤耦合的高耦合效率。

另一种在集成光学中常用的结构是内扩散波导（见图 3.7）。它由掺杂扩散制成，衬底折射率为 n_s，扩散位置的折射率会增大。该波导的单模性质取决于折射率分布，它是掺杂浓度分布的函数。为了从理论上设计内扩散波导，需要测量扩散分布和生成的折射率分布。有关内扩散光波导单模的实验研究，请参考 Petermann[20]。

通常，内扩散、脊形、脊形管、脊形夹层波导的包层为空气。不过，用其他材料做包层可以保护波导层免受灰尘脏污，并且减小芯层－包层的折射率比，从而减小粗糙表面散射损耗。这种波导在文献中称为“埋层波导”，如，埋层脊形波导或脊形波导管。

低损耗泄漏和增益导引平面光波导

光学波导也导引低损耗泄漏波。特别是高透振荡光波导（ARROW）应用了这种导引机制。ARROW 最初由 Duguay 等人提出[21]，用于设计集成光偏振器。通常 ARROW 一般在一个方向上采用折射率导引，而在另一个方向上用谐振镜，请参考 Gerces 等人[22]和 Zmudzinski 等人[23]的文献。ARROW 对制造容差比折射率导引结构更加敏感。为了完整的介绍这类波导，我们还应该提到另一些使用低损耗泄漏波导引机制的波导结构，如束腰脊形波导[24]。

增益导引结构只在半导体激光器中使用。电流通过激光器的有源区产生正增益，从而在横向导引光。这种结构在纵向为折射率导引[25]。增益导引型波导的模的波阵面为一个弧面，这与折射率导引的模不同[25]。

3.2.2 平面光波导实例

制造光学集成结构的材料一般包括：Ⅲ－Ⅴ半导体、硅、硅玻璃、铌酸锂和树脂塑料。某一种材料和技术是否适合制造特定的光波导器件，取决于如下一些因素：

- 晶圆尺寸、价格和可用性；
- 延晶沉积质量、厚度和价格；
- 刻蚀质量、深度和价格；
- 工作波长的透过率；
- 能否进行开关动作；
- 能否做成有源器件：光源和放大器；
- 能否做成探测器；
- 能否和集成电路集成。

Ⅲ－Ⅴ半导体的晶圆质量较好，制造工艺完善。电光效应和电吸收效应可以实现高速电吸收和电光开关。Ⅲ－Ⅴ半导体制造的激光二极管光源的波长可跨越 700～1600nm 的范围，即所有和通信有关的波长。Ⅲ－Ⅴ半导体也可以制造近红外光探测器。虽然有源和无源器件的集成领域不断有进展，例如量子阱混杂技术[26]，但一直还存在困难。

绝缘体上硅（Silicon On Insulator，SOI）技术使用硅晶圆，以及制造集成电路的标准硅工艺。该技术非常适合制造在当今质量非常高的无源波导集成光路。Si 技术的主要优势在于它有和集成电路集成的可能性。但是，硅并不适合制造全功能光子光路。硅技术的一个缺陷在于，这种材料无法制造出在主流光通信波长的 1.3μm 和 1.55μm 工作的光敏二极管。虽然如此，但在理论上，可以实现硅基光敏二极管在 1.55μm 波段工作[27]。因为晶体对称性，所以硅没有电光效应，因而无法制造高速电光调制器。到目前为止，硅基调制器可以实现 2.5GHz 带宽。另外，因为 Si 为非直接禁带半导体，所以其较难高效泵浦相干光。不过，依然有很多研

究，基于拉曼效应实现了硅相干光源[29]。

铌酸锂有较大的电光系数，从而主要用于制造高速调制器[30]。该材料无法制造光源和探测器。不过可以通过向铌酸锂掺杂 Er 离子制造 1.55μm 工作波长的光放大器[31]。

硅玻璃技术制造的波导在 1.55μm 波长的损耗最低。该技术同时也第一个实现了增益为 20dB 的商用掺铒波导放大器（EDWA）。硅玻璃的价格很低，但其并不适合制造高速光调制器、光探测器和电至泵浦相干光源。

最近另一类新开发出的材料是树脂塑料。它的主要优势在于低价格，且在理论上，有较简单的制造工艺，如压印和旋涂。树脂塑料有较大的电光常数，可以制造高速调制器[33]。掺杂稀土材料的树脂塑料波导也具有放大作用[34]。

有关平面光波导各种制造技术更详细的介绍请参考半导体激光器和集成光学方面的教科书[2,3,35,36]。

图 3.8 为平面光波导结构的一些实例。制造长方形波导一般使用硅玻璃或硅。

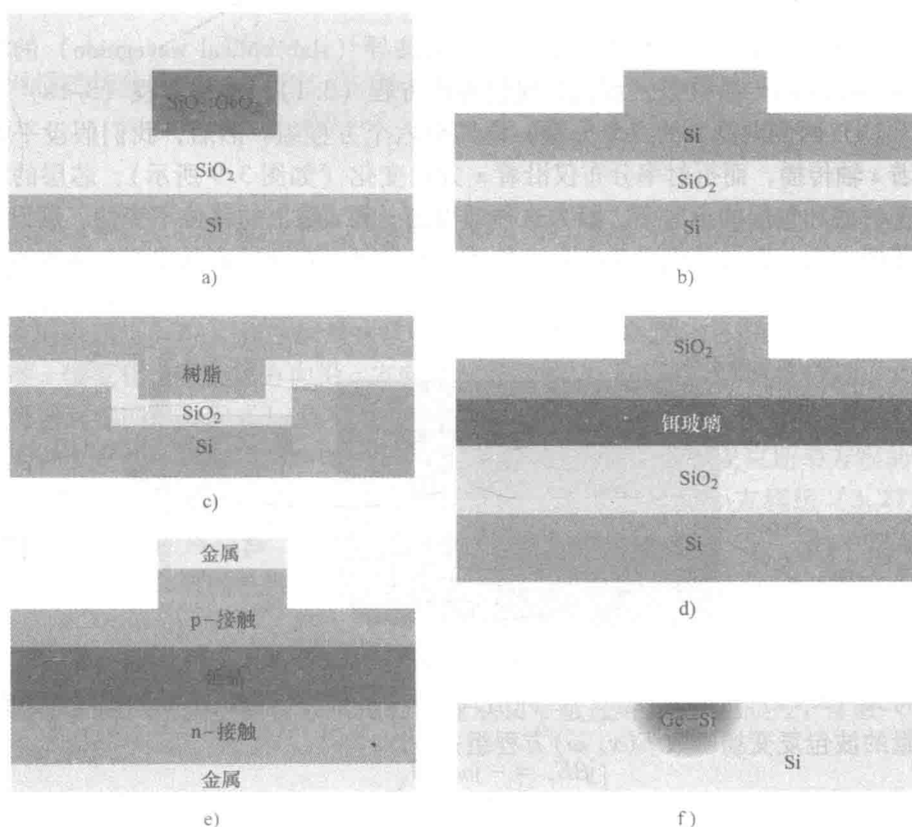


图 3.8　集成光波导实例

a）绝缘体上硅脊形波导　b）脊形波导　c）树脂塑料脊形波导　d）铒离子掺杂脊形夹层波导
e）半导体激光器内的脊形夹层波导　f）内扩散波导

长方形光波导（如图 3. 8a 所示）的制造工艺为：用氢氧焰灼烧沉积掺锗玻璃的热氧化硅晶圆。沉积层会刻蚀出长方形结构，然后在通过氢氧焰在长方形结构上沉积另一层硅玻璃[32]。图 3. 8b 所示为一个 SOI 技术制造的脊形波导。脊形波导是由刻蚀的 Si 层和非常薄的不透光 SiO_2衬底层构成[37]。树脂塑料波导（如图 3. 8c 所示）的制造，首先在硅衬底上刻蚀出一个凹槽，然后沉积硅玻璃层，最后旋涂上树脂塑料[38]。图 3. 8d 所示为一个脊形夹层波导的一般结构。这种脊形夹层波导用于掺 Er 集成光放大器[39]。脊形夹层波导可以减小粗糙表面散射损耗。它的缺点在于它有较大的像差，所以和标准单模光纤的基模场分布很难重叠。图 3. 8e 所示为另一种典型的脊形波导夹层结构，它用于半导体激光器[3]。在这种结构的激光器制造中，并不刻蚀有源层，以避免影响器件的可靠性。最后一个实例是 Ge 内扩散硅玻璃波导（如图 3. 8f 所示）。该工艺以简单见长。但是它的设计灵活性不足。扩散工艺也用于制作铌酸锂结构的波导。

3. 2. 3 平板光波导

在本节中，我们通过数值方法计算平板波导（slab optical waveguide）的场分布以及其相应的传播常数。首先，我们考虑方程（3. 1），按照方程（3. 1a）和方程（3. 1b）两侧向量场的三个分量，将其分六个方程组。然后，我们假设平板的模沿着 z 轴传播，而折射率分布仅沿着 x 方向变化（如图 3. 9 所示），芯层的折射率大于衬底和包层的折射率。因为这种结构在 y 和 z 轴上的移位不变性，假设 z 方向为传播方向，则波导模电磁场分布的每个分量可以在频域表示成两个函数的积的形式，如下所示：

$$X(x, z, \omega) = F(x, \omega)\exp(-j\beta z) \tag{3.25}$$

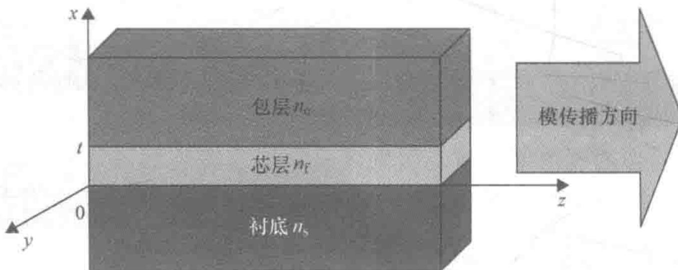


图 3. 9　直角坐标系下的三层平板波导

将式（3. 25）带入式（3. 1），并由式（3. 2）推导出两组电场和磁场向量的三个分量的波包复变场函数 $F(x, \omega)$方程组：

$$\begin{cases} j\beta E_y = -j\omega\mu_0 H_x \\ \dfrac{dE_y}{dx} = -j\omega\mu_0 H_z \\ -j\beta H_x - \dfrac{dH_z}{dx} = j\omega\varepsilon E_y \end{cases} \tag{3.26a}$$

$$\begin{cases} j\beta H_y = j\omega\varepsilon E_x \\ \dfrac{dH_y}{dx} = j\omega\varepsilon E_z \\ -j\beta E_x - \dfrac{dE_z}{dx} = -j\omega\mu_0 H_y \end{cases} \tag{3.26b}$$

因此，一个平板波导的两种模，只包含三个电磁场分量。方程组（3.26）解出的模的三个场分量为 E_y，H_x，和 H_z。因为电磁场向量的纵向（沿着传播方向）分量只有 H_z，所以这个模称为“横电场”（TE）。以此类推，方程（3.9b）描述的模称为“横磁场（TM）”。

由方程组（3.26）消掉 H_x和 H_z，可得：

$$\frac{d^2E_y}{dx^2} + (n^2k_0^2 - \beta^2)E_y = 0 \tag{3.27a}$$

同理，由式（3.9b）消掉 H_y和 E_y可得：

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{n^2}\ \frac{d(n^2E_x)}{dx}\right) + (n_2k_0^2 - \beta^2)E_x = 0 \tag{3.27b}$$

对横磁场分量，由方程组（3.26）分别可得 TE 和 TM 的方程式：

$$\frac{d^2H_x}{dx^2} + (n^2k_0^2 - \beta^2)H_x = 0 \tag{3.28a}$$

$$n^2\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{n^2}\ \frac{dH_y}{dx}\right) + (n_2k_0^2 - \beta^2)H_y = 0 \tag{3.28b}$$

至此，我们将求解偏微分方程组（3.1）化简为求解两个分离的二阶常微分方程组。方程组（3.27）和方程组（3.28）重要的一点在于，它们对任何折射率分布只随 x 轴变化，且传播方向沿 z 方向的波导都成立（实际上，假设传播方向为 y 方向可得到相同的方程式）。

当一个平板波导有连续均匀的折射率分布时，我们可以求麦克斯韦方程的解析解。我们首先推导，在包含三个均匀材料层的平板波导情况下方程组（3.27）和方程组（3.28）的解析解（见图 3.9）。因为在若干教科书[2,3,40-42]中，可以找到计算本征模传播常数的色散方程解析解的推导。这里我们只梳理这一过程的主要步骤。

对每个均值层，方程组（3.27）和方程组（3.28）可以得到解析解。解的形式取决于 $n^2k_0^2 - \beta^2$ 因子的符号。我们因此定义平板波导的三层的三个常数（见图 3.9）为

$$\begin{aligned} p^2 &= \beta^2 - n_c^2k_0^2 \\ q^2 &= \beta^2 - n_s^2k_0^2 \\ h^2 &= n_f^2k_0^2 - \beta^2 \end{aligned} \tag{3.29}$$

如果 β 大于 n_ck_0 和 n_sk_0，则芯层的解是正弦和余弦函数的组合。另外，x 方向

的解的形式是指数函数，即从波导中心向外，场分布呈指数衰减（如图 3.10 所示）。为了确切的描述波导结构的厂分布，我们需要计算 A、B、C、D 四个常数（见图 3.10），以及它们相应的传播常数 β。考虑正切场分量在 $x=0$ 和 $x=t$ 处（图 3.9）的连续性条件，可得到 TE 的四个齐次代数方程组：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ \cos(ht) & \sin(ht) & -1 & 0 \\ 0 & h & 0 & -q \\ -h\sin(ht) & h\cos(ht) & p & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{bmatrix} = 0 \tag{3.30a}$$

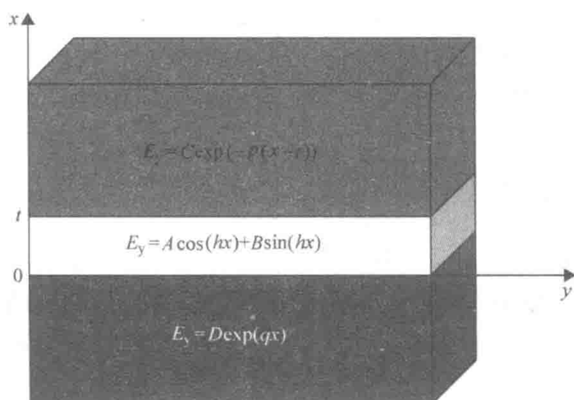


图 3.10　描述平板波导 TE 模在 x 方向 E_y 关系的函数

以及 TM 的方程组：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ \cos(ht) & \sin(ht) & -1 & 0 \\ 0 & \dfrac{h}{n_f^2} & 0 & -\dfrac{q}{n_s^2} \\ -\dfrac{h}{n_f^2}\sin(ht) & \dfrac{h}{n_f^2}\cos(ht) & \dfrac{p}{n_c^2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{bmatrix} = 0 \tag{3.30b}$$

由线性代数运算性质，当且只当它的行列式等于零时，齐次代数方程有非零解。对 TE 计算式（3.30）中系数矩阵的行列式，并使它等于零，可得到如下方程：

$$\tan(ht) = \frac{\dfrac{q}{h} + \dfrac{p}{h}}{1 - \dfrac{q}{h}\dfrac{p}{h}} \tag{3.31a}$$

同理，对 TM 由式（3.30b）可得如下方程：

$$\tan(ht)=\frac{\dfrac{q}{h}\dfrac{n_f^2}{n_s^2}+\dfrac{p}{h}\dfrac{n_f^2}{n_c^2}}{1-\dfrac{q}{h}\dfrac{n_f^2}{n_s^2}\dfrac{p}{h}\dfrac{n_f^2}{n_c^2}} \tag{3.31b}$$

由 $\tan(\alpha+\beta)=(\tan\alpha+\tan\beta)/(1-\tan\alpha\tan\beta)$，我们可将式（3.31a）改写为

$$ht=\arctan\frac{q}{h}+\arctan\frac{p}{h}+m\pi \tag{3.32a}$$

以及式（3.31b）可改写为

$$ht=\arctan\left(\frac{q}{h}\frac{n_f^2}{n_s^2}\right)+\arctan\left(\frac{p}{h}\frac{n_f^2}{n_c^2}\right)+m\pi \tag{3.32b}$$

其中 m 为表征模阶数的参数。引入归一化频率 V，相对传播常数 B 和非对称参数 A_E：

$$V=k_0t\sqrt{n_f^2-n_s^2}\;;\;B=\frac{\beta^2-n_s^2k_0^2}{n_f^2k_0^2-n_s^2k_0^2};\;A_E=\frac{n_s^2-n_c^2}{n_f^2-n_s^2}$$

对 TE 模，将式（3.32）改写为更简明的归一化形式：

$$V\sqrt{1-B}-\arctan\sqrt{\frac{B+A_E}{1-B}}-\arctan\sqrt{\frac{B}{1-B}}-m\pi=0 \tag{3.33a}$$

对 TM 模：

$$V\sqrt{1-B}-\arctan\left(\frac{n_f^2}{n_c^2}\sqrt{\frac{B+A_E}{1-B}}\right)-\arctan\left(\frac{n_f^2}{n_s^2}\sqrt{\frac{B}{1-B}}\right)-m\pi=0 \tag{3.33b}$$

由式（3.33）可以解出 V 和 B 的关系。不过，实际上我们需要对一个给定的波长（以及平板波导的参数：n_f，n_s，n_c 和 t）知道其传播常数，当由归一化参数推导时我们需要对给定的 V 值计算 B。为此，我们需要方程（3.33）的数值解。

计算非线性代数方程组零点的标准数值方法，如对分法，可以求解方程（3.33）。算法 3.1 总结了求解三层平板波导传播常数计算的主要步骤。

按算法 3.1 写的 MATLAB 脚本如下所示。

算法 3.1　通过求式（3.33b）零点计算三层平板波导的传播常数

1. 开始；
2. 设置波长、折射率、波导厚度和模阶数值；
3. 通过求式（3.33b）零点计算间隔终点的传播常数值；
4. 由对分法优化传播常数；
5. 停止。

```
% program calculates propagation constants for slab waveguide
clear  % clears variables
clear global  % clears global variables
format long e
% initial constants
i=sqrt(-1); % remember not to overwrite pi or i !
pi=3.141592653589793e+000;

lam=1.55; %wavelength [micrometers]
nc=3.2874; % refractive index in cladding
nf=3.3704; % refractive index in core
ns=3.2874; % refractive index in substrate
g=2.; % waveguide thickness [micrometers]
m=0; % mode order

aE=(ns*ns-nc*nc)/(nf*nf-ns*ns); % parameter AE for TE modes
nH(1)=nf*nf/(ns*ns);
nH(2)=nf*nf/(nc*nc);

% calculation parameters
k=2.0*pi/lam; % wavenumber
V=g*k*sqrt(nf^2-ns^2); % normalised frequency V

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Calculation of initial interval locating B
% for bisection method
b=(0.0199999:0.01:0.9999999);
% Dispersion equation
DE=m*pi+atan(nH(1)*sqrt(b./(1-b)))+...
atan(nH(2)*sqrt((b+aE)./(1-b)))-V*sqrt(1-b);

% precise initial location of B
length=size(b);
for j=length(2):-1:2
   if DE(j)/DE(j-1)<0
      break
   end
end

if j==2
   disp('no zero found, change initial interval')
   disp('the results are incorrect')
end

btop = b(j);
bbot = b(j-1);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% bisection method for root finding starting
% from the initial interval
DEtop=m*pi+atan(nH(1)*sqrt(btop/(1-btop)))+...
```

```
atan(nH(2)*sqrt((btop+aE)/(1-btop)))-V*sqrt(1-btop);
DEbot=m*pi+atan(nH(1)*sqrt(bbot/(1-bbot)))+...
atan(nH(2)*sqrt((bbot+aE)/(1-bbot)))-V*sqrt(1-bbot);
jmax=100; % maximum number of bisections
tolerance=0.00000000000001; % tolerance for finding B

for j=1:jmax
   bcen=(btop-bbot)/2+bbot;
   DEcen=m*pi+atan(nH(1)*sqrt(bcen/(1-bcen)))+...
   atan(nH(2)*sqrt((bcen+aE)/(1-bcen)))-V*sqrt(1-bcen);
   if DEtop/DEcen > 0
      btop=bcen;
      DEtop=DEcen;
      else
      bbot=bcen;
      DEbot=DEcen;
   end

   delta=btop-bbot;
   if delta < tolerance
      break
   end
end
%end of bisection method loop
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% checks for tolerance
if j==jmax
   disp('maximum number of bisections exceeded before reaching
   tolerance')
else
   out=bcen;
end
% variable 'out' stores the relative propagation constant B

nin=abs(sqrt(out*(nf*nf-ns*ns)+ns*ns));
% calculation of effective index

[V out nin] % plotting results in one line
```

将两个单位向量“nH”设置为1，可以得到TE模的传播常数。对导引模，B为正且小于1，所以上面的程序首先将B的范围限定在$0.0199999 < B < 0.9999999$之间。这个初始化假设对大多数情况都可适用。不过当一个模接近截止波长或距离截止波长非常远的情况时，这个假设需要修正。第二步，通过对分法求解并更新初始假设，精度由“tolerance”变量设定。当计算出传播常数后，就可以通过带入β和求解（3.30）出计算A、B、C、D常数和场分布。因为代数方程组（3.30）线性相关，首先需要设定一个参数的值，例如，设$A = 1$，从而约去一个方程，继而由剩余的三个方程求解出B、C和D。

算法 3.2 用有限差分法计算三层平板波导的传播常数

1. 开始；
2. 设置有限差分网格；
3. 设置波长、折射率、波导厚度和模阶数值；
4. 设置有限差分系数矩阵；
5. 求解特征值问题；
6. 选择所对应模的特征值和特征向量；
7. 画出模分布图；
8. 停止。

如果多层平板波导中每一层为各向同性[43]的或单轴各向异性[44]，且它的折射率都是均匀分布的，则我们可以得到解析解。一些渐变折射率的光波导也可以得到解析解[2]。有关这一课题更详细的信息，包括最新的研究，可阅读 Ding 和 Chen[45]，Anemogianis 等人[46,47]，以及 Sujecki[48]等参考文献。

考虑一个任意折射率分布 $n(x)$ 的波导，通过有限元方法求方程（3.26a）和方程（3.26c）的数值解格外简单。因为未知函数连续，所以在 $x=x_0$ 处的标准有限元逼近为

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2 H_x}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=x_0} \approx \frac{1}{\Delta x^2}\left(H_x(x_0-\Delta x)-2H_x(x_0)+H_x(x_0+\Delta x)\right) \tag{3.34}$$

将式（3.34）带入式（3.26c），并按照有限元方法的标准步骤[49]，我们可得出一个可用标准数值方法[50]求解的代数本征值问题。算法 3.2 总结了有限元方法求解平板波导波动方程的主要步骤。

一个简单的有限元方法求解方程（3.26c）的 MATLAB 实例如下：

```
% calculation of slab waveguide modes using FDs
pi = 3.141592653589793e+000;
N = 800;% total number of mesh points
A = zeros(N);% initialisation of matrix A
Nw = 100;% number of mesh points in waveguide
t = 2;% slab thickness in [micrometers]
dx = t/Nw;% dx in [micrometers]
lam = 1.55;% wavelength in [micrometers]
k0 = 2*pi/lam;% wave number k0
nf = 3.3704;% refractive index in core
ns = 3.2874;% refractive index in cladding
nc = 3.2874;% refractive index in substrate
x = dx*(1:N);% vector with the positions of sampling points
```

```
c = 1/(dx*dx);
% setting off diagonals
for j = 1:N-1
A(j,j+1) = c;
A(j+1,j) = c;
end

% setting up vector storing the values of refractive index

n = ns*ones(N,1);
for j = N/2:N
n(j) = nc;
end

for j = (N/2-Nw/2+1):(N/2-Nw/2+Nw)
n(j) = nf;
end

% setting main diagonal
A = A+diag(n.*n*k0*k0-2*c);

[V,Ba] = eig(A);

[max_eig,max_pos] = max((real(diag(Ba))));
% the largest eigenvalue corresponds to fundamental
% propagating mode:
beta = sqrt((((Ba(max_pos,max_pos)))))
neff = beta/k0%effective index
```

使用稀疏矩阵可以提高这个代码在 MATLAB 环境中的运行性能。需要注意的是，用标准高阶有限元方法逼近 H_x的二阶微分，并不会提升收敛率。这是因为 H_x的更高阶微分不连续[51]。对 TM，式（3.34）的二阶微分无法用标准有限元方法逼近，但是可以稍微改进得到一个正确的有限差分模板[52]。更多关于有限元离散化方法的信息可查阅 Sujecki[48]。

表 3.4 选择有效折射率的参考值

有效折射率	模	
	TE_0	TM_0
结构 1	3. 35798693676	3. 35770896615
结构 2	3. 28735394812	3. 28551251240
结构 3	2. 35113096409	1. 82906299792

在表 3. 4 中，我们列出了分析法计算的传播常数参考值[43]。这些结果可以用于光学平板波导建模分析软件的开发。结构 1 为一个 GaAs 对称平板波导。其芯层和包层的折射率分别等于 3. 3704 和 3. 2874。波导芯层宽度为 2μm。多层波导结构 2 和结构 3 构成了一个复量子阱结构[53]。两个波导包含了 56 个宽度为 0. 0012 的壁

和 55 个宽度为 0.007 的阱。阱的折射率等于 3.3704。第二种结构中壁的折射率为 3.2874，包层折射率为 3.2224。第三种结构壁和包层的折射率分别为 1.6 和 1.5。所有结构的工作波长均为 1.5μm。本节中使用的分析软件可以以任意精度计算"结构 1"的平板波导的参考结果。在标准 PC 上，有限元分析法只可以得到有限精度的结果，不过，它可以适用于所有三种结构，请参看参考文献[54]。

一个平板波导，除了传导模之外，还有衬底模和自由空间辐射模。很多书籍中可以找到描述这些模的场分布公式的推导[3,40,41]。研究平板光波导的光传播时，数值算法中完整的函数基本类，可以计算传导模、衬底模和自由空间辐射模。这些方法涉及模匹配法，我们将会在本章"平板光波导的传播常数计算方法"一节和第 4 章"光束传播法"中加以讨论。

虽然折射率分布是在纯实域，但方程（3.31）~方程（3.33）可以允许传播常数 β 有复数解。在文献中，这种模叫作"泄漏模"。泄漏模的特性是场沿芯层向外呈指数增长。这种场的线性的一个简单的解释可参考 Rozzi 和 Mongiardo 文献[42]。泄漏模对于研究截至波长以内的光在波导中传播，以及对于计算 ARROW 模的传播常数非常重要[41]。泄漏模也提供了一种处理辐射模连续谱的便捷方法。有关泄漏模的理论可参考 Hu 和 Menyuk 的文献[57]。

最后，方程（3.27）和方程（3.28）也允许一对复共轭传播常数模的解，即使折射率分布是纯实域的。在文献中，这一对模被称为"复模"，请注意与泄漏模相区别。复模对于衡量光束传播算法数值稳定性很关键[59-61]（参考第 4 章）。

3.2.4 有效折射率法

如果折射率在 x 方向上没有变化（见图 3.1），方程（3.10）可化简为方程（3.27）和方程（3.28），它们可简洁地表示为

$$(a_{\mathrm{TE}}+\omega^2\mu_0\varepsilon)E_x=\beta^2E_x \tag{3.35a}$$

$$(b_{\mathrm{TE}}+\omega^2\mu_0\varepsilon)H_y=\beta^2H_y \tag{3.35b}$$

$$(a_{\mathrm{TM}}+\omega^2\mu_0\varepsilon)E_y=\beta^2E_y \tag{3.35c}$$

$$(b_{\mathrm{TM}}+\omega^2\mu_0\varepsilon)H_x=\beta^2H_x \tag{3.35d}$$

算子 a_{TE}，a_{TM}，b_{TE}和 b_{TM}见表 3.5。

与此相似，由式（3.15）的标量近似，我们可得：

$$(s_{1\mathrm{D}}+\omega^2\mu_0\varepsilon)\phi=\beta^2\phi \tag{3.36}$$

其中

$$s_{1\mathrm{D}}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

在 1D 情况下，由 TE 极化模的标量近似也可得到相同的传播常数值。

表3.5 a_{TE}、a_{TM}，b_{TE}和b_{TM}算子

	a	b
TE	$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
TM	$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\varepsilon\circ)}{\partial x}\right)$	$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\circ)}{\partial x}\right)$

对一些平板波导结构，可以用等效的1D结构近似2D结构。进行这种近似的标准方法是用有效折射率计算，即有效折射率法（EIM）。EIM可以将方程3.10的解化简为方程（3.34）的解，如上一节讨论的，这个解更加简单。EIM可以近似求解半向量和标量2D方程。EIM基于分离变量法。它假设一个2D场分布可以表示为两个1D场分布的乘积。举例说明，我们用EIM推导x极化基模的EIM解。设解的形式为$E_x(x, y, \omega) = X(x, \omega) * Y(y, \omega)$，代入式（3.14a）得：

$$X\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + Y\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\varepsilon X)}{\partial x}\right) + \omega^2\mu_0\varepsilon XY = \beta^2 XY \tag{3.37}$$

将式（3.37）的左右两边同时除以XY，并将常数移动到右侧（RHS），可得：

$$\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{X}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\varepsilon X)}{\partial x}\right) = -(\omega^2\mu_0\varepsilon - \beta^2) \tag{3.38}$$

引入分离常数可得两个1D方程：

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \omega^2\mu_0\varepsilon Y = \beta_{\text{eff}}^2 Y \tag{3.39a}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\varepsilon X)}{\partial x}\right) + \omega^2\mu_0\varepsilon_0 n_{\text{eff}}^2 X = \beta^2 X \tag{3.39b}$$

其中，平板波导基模的有效折射率为$n_{\text{eff}} = \beta_{\text{eff}} l k_0$，其中$k_0 = 2\pi/\lambda$。$n_{\text{eff}}$随$x$的变化关系可由式（3.39a）计算，而式（3.39b）可求出“有效”平板波导基模的传播常数，即原2D波导基模传播常数的近似值。从而，EIM将一个2D问题化简为一个有解析解的1D问题。图3.11所示为EIM求解脊形波导管的示意图。与此类似，有效折射率近似也可以处理y极化和标量的情况。

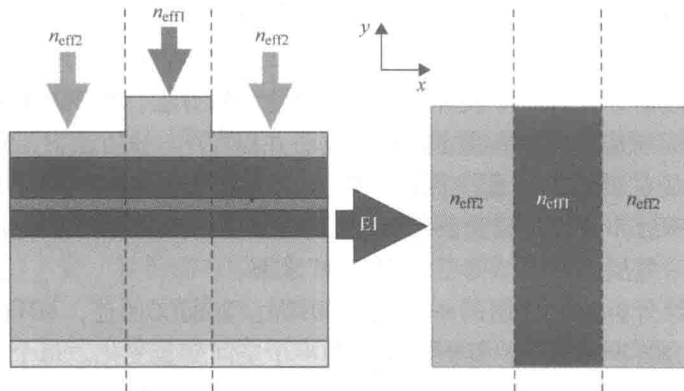


图3.11 脊形夹层光波导的有效折射率法示意

EIM 最初由 Ramaswany[62] 提出，与 Marcatili[7] 提出的分析长方形波导的近似方法紧密相关。EIM 因其简单、稳健，和灵活性，广泛应用于光子学。EIM 的主要缺陷是在分析实际的光波导结构时存在精度问题。因此，参考文献［63－67］提出了精度更高、计算效率较好的近似方法。对包层介质是空气的光波导，芯层和衬底层折射率比较小，实际用谱折射率法近似[68.69]。Robson 和 Kendall[70] 相对通俗地阐述了平板光波导的近似数值方法。

3.2.5 平面光波导的传播常数计算

平板光波导的建模方法，根据求解方程的不同而分为三类。向量法用于求解向量波动方程（3.12）。半向量法用于求解波动方程的极化近似方程（3.14），而标量法则求解标量波动方程（3.15）。求解平板光波导的方程（3.12）、方程（3.14）和方程（3.15）有四种重要的数值方法：

- 模匹配法（Mode Matching Method，MMM）；
- 直线法（Method of Lines，MOL）；
- 有限差分法（Finite Difference Method，FDM）；
- 有限元法（Finite Element Method，FEM）。

平面波导分析的每种数值方法都有它们独特的优点。通常，前两种方法，即 MMM 和 MOL，需要较少计算资源，同时它们的灵活性较低。特别是 MMM 和 MOL 对某些常见结构，可支持病态数值条件下的求解[71]。而后面两种方法，即 FEM 和 FDM 则消耗较大的计算资源，不过稳健性相对较好。

MMM 是一种解析方法。解析法是一种从求解偏微方程发展而来的解析方法。对平板光波导，解析法按光波导的横截面，主观的分为子区域，使得其偏微分方程更容易求解。然后用这种局部解析解拼接成在全域都成立的全局解析解，即满足边界条件。问题求解也可导出计算传播常数的色散方程。分析平板光波导有两种解析法。一种方法（MMM）将波导横截面按折射率分为若干子区域，其折射率变化只和一个横向空间变量有关[20,71－83]。另一种方法采用一个子区域集，它的折射率是一个常数[8,84]。所以，该方法只在波导横截面可以分为若干折射率为常数的子区域时有效。

将波导横截面分为若干常数折射率子区域的分析方法，可以非常有效的求解向量波动方程，特别是对长方形波导的向量波动方程[8,84]。该方法对沿着边界若干点上不同区域的场扩散进行匹配。因此，该方法一般称为点匹配法（PMM）。PMM 一般用于折射率分布分段连续光波导结构。不过，目前为止我们讨论的波导中，只有简单的芯层－包层光波导结构可以用 PMM 求解。

平板光波导分析中更成用的解析法是 MMM。如前文所述，MMM 将波导横截面按折射率分为若干子区域，其折射率只随一个空间变量变化。每个子区域内的场分布是局部平板波导场分布模型的和。对所有局部展开的模，选择同一个纵向空间

变量关系保证了纵向的连续性。这个运算，通常称为“旋转”[85]。对两个区域边界上横平面，连续性条件包括两个横向场分量：方程（3.12a）描述的电场和方程（3.12b）描述的磁场。该过程导出一个线性代数方程组，其未知数对应了局部模展开系数。最后，再对局部模分布求重叠积分，该步骤请特别参考参考文献[74]。通过让线性代数方程组的系数矩阵的行列式等于零，可以求解出传播常数。

如果用局部模展开求出方程（3.14）或方程（3.15）的解，然后就可以分别得到半向量MMM和标量MMM。理论上，MMM与前文所述的EIM步骤相同。它与EIM唯一不同之处在于，EIM只有第一项是模展开[13]。MMM最适合无损耗结构的波导，它的横截面可以分为若干个常数折射率的长方形区。MMM开发软件推导和评估解析表达式的开销一般较大。传输线理论[72,76,77]可以简化推导过程。开发稳定的MMM代码相关指导可参考Sudbo[71,73]。MMM分析复折射率分布的光波导结构的实例可参考Bienstman[85]。MMM还可以很好的支持分析平板光波导的近似解析法[20,74,75,77,80,81]。

另一类解析法适用傅里叶变换，它目前包括两种方法。一种方法是用傅里叶序列展开表示全横截面的解[86,87]。该方法实现简单，最后得到一个稠密矩阵线性特征值问题，用标准线性代数工具包可以非常简单地解决这个问题。另一种方法是按只与一个坐标相关的折射率分布，将横截面分为若干区域（与MMM相同）。然后在傅里叶域表示每一个子区域，在沿着区域间的边界进行匹配，最后得到全局解。这种方法最后得到一个超越方程，它可以解出传到模的传播常数[81,88-90]。当适当选择折射率的值，用均匀介质自由空间辐射模近似平板波导的自由空间辐射模后，我们可以得到对小折射率比光波导结构非常有效和精确的自由空间辐射法（FS-RM）[79]。长久以来，傅里叶法只能应用与求解标量和极化近似的波动方程，直到最近，出现了求解向量波动方程的傅里叶序列法[91]。

与MMM不同，FDM是一种稳健性和灵活性都很高的方法。通常，它对内扩散波导和对长方形波导一样有效。因此，FDM可以适用于任意折射率分布的结构，例如，折射率受到载流子、应力和温度分布影响的激光二极管。FDM也相对简单，且解析推导较少。因此，它的程序和MMM相比也相对简单。另一方面，FDM需要的计算资源要比MMM多很多。因此，众多研究致力于提高FDM的数值计算效率。但是，这些性能提升大多以牺牲稳健性为代价，或将计算开销转移到解析推导和程序开发上。提升有限差分法性能的一种途径是直接使用非均匀网格[92,93]，采用相似变换[94]，或是亚网格技术[95]。因为FDM一般都会最后归结为一个稀疏矩阵特征值问题（由FDM公式得到一个广义特征值问题的例子，可参考Sujecki[48]和Chiou等人[96]），另一种提高有限差分法效率的方法，是用现代数值方法处理稀疏矩阵特征值问题[97-99]。对折射率比较大的光波导结构，引入有效透射深度可以提高计算效率[100]。另一种提高向量FDM的方法是先用标量或半向量FDM求解，在用向量修正以得到更加精确的传输常数[101]。这是由于求标量或极化解要比求向量

解的矩阵小四倍。

大多数平板光波导具有的介质不连续，导致了场的不连续。因为标准有限差分近似要求连续函数，所以我们需要根据函数不连续性修正 FD 模板。通常，有两种方法可以对有限差分波动方程进行离散化处理。一种方法是将介质不连续面放置在网格节点之间[51,52,102,103]，另一种方法是将网格节点与介质不连续面重合[104-109]。后一种方法可以用磁场或只用磁场向量位势求解波动方程[110]。最新研究的 FD 模板用 FD 系数表达式的高阶展开，描述任意位置的介质不连续。详细请参阅[48, 53, 54, 111, 112]等参考文献。

FDM 还可以处理斜边界和芯层 - 包层大折射率比的光学波导结构[111,113-115]。FDM 在分析增益和各向异性波导方面稳健性也较好[109]。最后，我们需要注意 FDM 一般是一个强边界问题表达式，但是它是一个弱（变分）表达式。我们也可以采用与 FEM 相似的处理[117-119]。

MOL 法可以将偏微分方程(3.13) ~ 方程(3.15)的求解简化为求解一组常微分方程。它采用有限元（FEM）方法或沿着波导横向方向的有限差分法进行简化。MOL 兼具前文所述的 FDM 和 MMM 的优点。如果我们用三点有限差分金丝，则可以得到一个形式如下的常微分方程组：

$$\frac{d^2\phi_i}{dx^2}+M\phi_i=\beta^2\phi_i$$

式中，M 是一个对角矩阵，ϕ_i 是沿着“i”方向的场分布。通常，求解常微分方程先要对矩阵 M 做对角化。这样，用有限差分计算平板波导的振型谱，并用横向振型得到线性代数方程组性对比较容易。对标量、极化和向量情况，求这个线性方程组的行列式，可以得到一个非线性特征值问题[120,121]。这一过程，MOL 有和 FMM 相似的特性。但对比 FMM，MOL 计算平板波导模更为简单。对求相同阶的行列式，它可能在精度上略逊 FMM。我们需要注意，一般我们不需要求矩阵 M 的对角化矩阵的行列式。MOL 也不必然会得到一个非线性特征值问题。例如，如果用一个正弦函数集近似某一方向的场分布，而不用横向振型时，MOL 会得到一个线性特征值问题[122]。有关 MOL 在光波导方面应用更深入的研究，请参阅 Pregla 的相关文献[123]。

有限元法（FEM）与 FDM 法有相似的一般特性。它的稳健性较好，但和 MMM 和 MOL 相比数值效率较差。FEM 与 FDM 不同，是与一个方程（3.4b）相关的弱（变分）表达式。对向量情况，一个标准的 FEM，基于变分法[124]，可得：

$$\omega^2=\frac{\int(\nabla\times H)^*\varepsilon^{-1}(\nabla\times H)\mathrm{d}\Omega}{\int H^*\mu_0 H\mathrm{d}\Omega} \tag{3.40}$$

它是一个伪模。这一结果表明，由式（3.4a）直接得到的变分表达式（3.40），无法随意满足零发散条件。通过对式（3.1b）旋转变形，可以看出，找到式（3.40）

的稳定点才可以满足常数发散条件。对标量情况，不存在伪模[125]。消除或减少向量 FEM 的伪模有若干种方法。一种方法是添加补偿函数[124]。该方法在牺牲一定精度的情况下减少伪模。消除伪解的一种有效方法是采用切向元或边界元[126,127]。Hayata[128]、Koshiba 等人[129]，以及 Silveira 和 Gophinat[130]提出了其他消除伪模的方法。与 FDM 类似，影响 FEM 计算效率的关键是矩阵特征值问题。不过，与 FDM 不同，FEM 得到一个广义特征值问题[131]，它可以用专门处理稀疏矩阵的现代投影法较高效的求解[132]。到目前为止，还有没有用有限元法对场非连续性进行特殊处理的办法。这样做会降低 FEM 的精度，无法只对磁场求解波动方程。Li 等人[133]直接用波动方程的有限元表示，处理波导分析中的非连续性。该研究采用九点非均匀有限元，对极化近似的波动方程求解。

FEM 也是分析增益波导[134]和各向异性波导[135]的一种有效方法。FEM 用于光波导分析的优点和更详尽的描述，可以参考 Wang[136]、Fernandez 等人[137]，Koshiba[138]以及 Rahman 和 Agrawal[139]等文献。

与热传导建模不同，积分方程法并不是分析平板波导振型的主要方法。不过在最近，若干种边界元和积分方程法成为计算平板光波导传播常数的一种有效方法[140-144]。通常，这类方法与解析法类似，它们通过牺牲稳健性获得较高的计算效率。

最后，我们注意到，对平面光波导，高折射率比界面的边角会出现场奇点。这些场奇点会造成数值方法无法收敛，解在边角附近出现震荡，从而无法用基本函数标准集表示出精确的解[145]。只有局部场可以在边角处展开，才能精确的表示场的解[107,141,146-148]。

3.2.6 极化、标量化和有效折射率的比较

极化、标量化和有效折射率近似的精度，与波导结构有关。在本节中，我们将对比常见文献中平面光波导结构 1D 和 2D 的标量、极化和向量法。

表 3.6 表示了长宽比为 2:1 的长方形波导结构的归一化传播常数值：

$$B=\frac{\beta^2-n_s^2k_0^2}{n_f^2k_0^2-n_s^2k_0^2}$$

芯层的折射率为 1.5，包层的折射率为 1.45。波导工作波长为 1.15μm。我们使用 FDM[1]并以绝对误差为 5×10^{-5}计算出所有结果。表 3.6 中的结果表明，极化和向量分析结果的差别不超过 0.0001 量级。但是，对折射率比相对较小结构的标量法，其差别大于 0.1 量级（例如 $V=1.0$，即较短一侧的总长 $b=1.497172476279475\mu m$ 的 y 极化情况，）

表 3.6 长方形介质波导的归一化传播常数 B

($a/b=2$, $n_f=1.5$, $n_s=1.45$, $\lambda=1.15\mu m$, 见图 3.3)

V	SFD	极化	向量	极化	向量
	标量		x-极化		y-极化
0.4	0.0361	0.0334	0.0334	0.0305	0.0306
0.5	0.1118	0.1069	0.1068	0.1004	0.1005
0.6	0.2048	0.1991	0.1990	0.1900	0.1901
0.7	0.2962	0.2908	0.2907	0.2806	0.2806
0.8	0.3789	0.3740	0.3739	0.3635	0.3636
0.9	0.4508	0.4466	0.4465	0.4365	0.4366
1.0	0.5125	0.5090	0.5089	0.4996	0.4997

$$V = \frac{2b}{\lambda}\sqrt{n_c^2 - n_a^2}$$

表 3.7 为用 EIM 法求表 3.6 相同结构的归一化传播常数的结果。1D 和 2D 结果的区别随着归一化频率 V 的增大而减小。这是因为，有效折射率法中变量的可分性在截止模附近变弱[7]。表 3.7 的结果表明，1D 有效折射率法的结果比密集 2D 标量数值分析法更精确（如 $V=1.0$ 的 y 极化模）。不仅如此，EIM 和标量法计算出的传播常数值，给出了更精确和数值密集的极化法和标量法的上限。

表 3.8 为长宽比 2:1 的长方形波导的归一化传播常数值，其芯层的折射率值为 1.5，包层在 1.2～1.45 之间变化。工作波长为 1.15μm。我们使用 FDM[1] 并以绝对误差为 5×10^{-5} 计算出所有结果。表 3.8 的结果表明，当折射率比增大的时候，极化法和向量法的差别增大，但不会超过 0.001 量级。实际上，对大多数实际的长方形光波导，由于侧壁散射损耗，其折射率比 $\Delta_n=(n_f-n_s)/n_f$ 不会超过 7%[32]。这样结构的光波导，向量法和极化法的差别不会超过 0.0001 量级，这再一次印证了平板波导极化近似法的精度。与此相比，与标量法结果的差就会达到 0.1 量级（如 $n_s=1.2$ 的 y 极化模情况）。

表 3.7 有效折射率法计算的长方形介质波导的归一化传播常数 B

($a/b=2$, $n_f=1.5$, $n_s=1.45$, $\lambda=1.15\mu m$, 见图 3.3)

n_s	归一化传播常数		
	标量	x-极化	y-极化
0.4	0.0720	0.0706	0.0633
0.5	0.1476	0.1451	0.1344
0.6	0.2334	0.2301	0.2178
0.7	0.3175	0.3140	0.3014
0.8	0.3942	0.3909	0.3788
0.9	0.4619	0.4588	0.4476
1.0	0.5207	0.5179	0.5077

表 3.8 长方形介质波导的归一化传播常数 B

($V=1$, $a/b=2$, $n_f=1.5$, $\lambda=1.15\mu m$, 见图 3.3)

n_s	SFD	极化	向量	极化	向量
	标量		x - 极化（准 TE 模）		y - 极化（准 TM 模）
1.45	0.5125	0.5090	0.5090	0.4996	0.4996
1.4	0.5125	0.5052	0.5051	0.4860	0.4859
1.3	0.5125	0.4976	0.4970	0.4571	0.4567
1.2	0.5125	0.4897	0.4881	0.4258	0.4245

表 3.9 为 EIM 对相同结构波导求出的归一化传播常数。结果显示，对大折射率比的结构，x 和 y 极化模的 1D 有效折射率法都比 2D 的标量法精确。甚至对折射率比较小的结构，y 极化的 1D 有效折射率法也比 2D 标量法精确。表 3.8 和表 3.9 的结果有一次印证了标量法和 EIM 给出了标量法和半标量法计算传播常数的上限边界。同时可以看出，1D 有效折射率法，极化法和向量法的结果，随着芯层和包层折射率差的减小而减小。

表 3.9 有效折射率法计算的长方形介质波导的归一化传播常数 B

($V=1$, $a/b=2$, $n_f=1.5$, $\lambda=1.15\mu m$, 见图 3.3)

n_s	归一化传播常数		
	标量	x - 极化（准 TE 模）	y - 极化（准 TM 模）
1.45	0.5207	0.5179	0.5077
1.4	0.5207	0.5150	0.4942
1.3	0.5207	0.5087	0.4654
1.2	0.5207	0.5016	0.4340

表 3.10 为 $H=1\mu m$，$W=1.5\mu m$，$n_f=3.44$，$n_s=3.4$，$n_c=1.0$ 的脊形波导（见图 3.5）的归一化传播常数值。外层平板的厚度在 0.1 ~ 0.9μm 之间。工作波长为 1.15μm。我们使用 FDM[1] 计算出标量和极化法的结果，x 极化模和 y 极化模的向量法结果分别由 Hadley[108] 和 Vassallo[149] 算出。所有结果的绝对误差均为 5×10^{-5}。极化法和向量分析法结果之间的差别不超过 0.0001 量级，验证了脊形波导标量近似法有很好的精度。标量法的结果，x 极化模结果在小数点后第三位相差了八，y 极化模相差了 0.1 量级。

表 3.11 为 EIM 计算表 3.10 相同结构波导得出的归一化传播常数值的结果。对高度较小的外层平板，1D 和 2D 的差别较大，这是因为外层平板的模低于截止频率，且衬底折射率代替了外层平板有效折射率。由于外层平板模低于截止频率造成无法求出有效折射率的问题，是 EIM 的主要缺陷。2D 和 1D 结果的差别会随着外层平板高度增加而减小。这是因为浅刻蚀脊形波导与平板波导差别不大，所以变量

分离不会造成误差。同时，表 3.10 和表 3.11 的结果再一次验证了印证了标量法和有效折射率法给出了向量法和向量量法计算传播常数的上限边界。同样，长方形波导与此类似，1D 极化模的解要比 2D 标量法更精确（如 $h=0.7$ 的 y 极化模）。

表 3.10 有效折射率法计算的脊形介质波导的归一化传播常数 B

（$H+h=1\mu m$，$W=1.5\mu m$，$n_f=3.44$，$n_s=3.4$，$n_c=1.0$，$\lambda=1.15\mu m$，见图 3.4）

$h/\mu m$	SFD	极化	向量	极化	向量
	标量		x－极化（准 TE 模）		y－极化（准 TM 模）
0.1	0.3095	0.3018	0.3019	0.2674	0.2674
0.2	0.3129	0.3055	0.3057	0.2706	—
0.3	0.3176	0.3108	0.3110	0.2750	0.2751
0.4	0.3239	0.3178	0.3181	0.2810	—
0.5	0.3320	0.3267	0.3270	0.2888	0.2890
0.6	0.3420	0.3377	0.3380	0.2985	—
0.7	0.3542	0.3509	0.3512	0.3104	0.3107
0.8	0.3693	0.3672	0.3675	0.3253	—
0.9	0.3893	0.3884	0.3886	0.3453	0.3455

表 3.11 脊形介质波导的归一化传播常数 B

（$H+h=1\mu m$，$W=1.5\mu m$，$n_f=3.44$，$n_s=3.4$，$n_c=1.0$，$\lambda=1.15\mu m$，见图 3.4

$h/\mu m$	归一化传播常数		
	标量	x－极化（准 TE 模）	y－极化（准 TM 模）
0.1	0.3555	0.3552	0.3122
0.2	0.3555	0.3552	0.3122
0.3	0.3555	0.3552	0.3122
0.4	0.3555	0.3552	0.3122
0.5	0.3555	0.3552	0.3122
0.6	0.3586	0.3583	0.3122
0.7	0.3652	0.3649	0.3185
0.8	0.3751	0.3750	0.3279
0.9	0.3909	0.3909	0.3436

总而言之，许多实际很重要的平面光波导所得的结果显示，对比全向量分析法，极化近似的精度非常高。2D 标量分析只有在光波导结构折射率比非常低的情况下，才能得到和向量分析以及极化近似法类似的精度。结果显示，1D 有效折射率分析法对慢刻蚀脊形光波导管以及折射率比较小的长方形光波导有较好的精度。但是，EIM 的精度在截至模附近快速下降。对 y 极化模，1D 有效折射率法比数值

更密集的2D标量法精度更好。其结果印证了2D标量法和有效折射率法给出了向量法和向量量法计算传播常数的上限边界。

3.3　光纤

光纤与平面光波导的几何特性不同，因而其制造工艺也不尽相同。虽然有可以兼容制造平面波导和光纤的技术，但是两者在结构上明显的差别需要不同的工艺实现。光纤和平面光波导的区别之一是芯层与包层的曲面边界。前面各章讨论的数值方法通常无法处理曲面边界的结构。因此，我们需要找到可以有效处理光纤的数值方法。在本节中，我们将对这些方法进行讨论。

3.3.1　光纤中的导引

光纤分为两类：传统光纤和微结构光纤（Microstructured Optical Fiber，MOF）。传统光纤作为长距离光通信系统的传输媒介，起源于20世纪60年代早期。MOF起源于20世纪90年代，它克服了传统芯－包层光纤的一些缺陷，主要用于在非通信应用中。

传统光纤可以同时依靠折射率导引和其他导引机制，以实现低传输损耗。最简单的传统光纤结构为阶梯折射率圆光纤（如图3.12所示）。这种光纤结构中，芯层半径为a，折射率为n_c，外面包裹着无限延展的折射率为n_a的包层，且$n_c > n_a$。（实际结构中，包层很大但半径有限）对一个阶梯折射率圆光纤，麦克斯韦方程组有解析解[150]。阶梯折射率圆光纤可导引三种模：混合模，横向电（TE）和TM模。混合模全部六个分量可以分为两类：HE_{mn}模和EH_{mn}模。

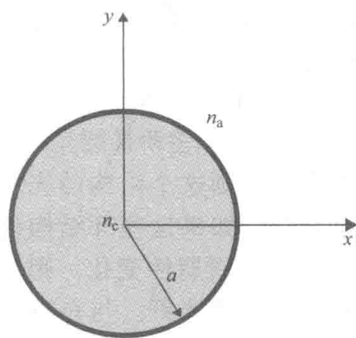


图3.12　阶梯折射率圆光纤

TE模只有E_θ、H_r和H_z分量，TM模有H_θ、E_r和E_z分量。对中等折射率比的结构，阶梯折射率圆光纤的基模为HE_{11}模。HE_{11}模近乎于线性偏振，可以导引任何波长的光。因为圆形光纤结构的对称性，线性偏振的方向是随机的。第一高阶模是TE_{01}模，它与另外两种模属于一类，即TE_{01}、TM_{01}和HE_{21}。单模截至条件为方程$J_0(V)=0$第一零点的集合，其中J_0为零阶第一类贝塞尔函数，$V=\frac{2\pi}{\lambda}a\sqrt{n_c^2-n_a^2}$，$\lambda$为工作波长。当芯层和包层的折射率比很小时，圆光纤所有的模都变为线性偏振模。阶梯折射率圆光纤光学性质更具体的描述请参考参考文献［55，151－154］。

原则上，阶梯折射率光纤的芯层可以有各种形状。在文献中，有椭圆形、三角形、正方形（请参考 3.2.1 节）以及其他形状的光纤芯层。特别值得注意的一种结构是椭圆形芯层光纤。与圆光纤类似，麦克斯韦方程对椭圆形芯层光纤也有解析解（如图 3.13 所示）[155]。椭圆形光纤中所有的模都是混合模（即有六个电磁场分量），它们可以分为四类：$_{o}HE_{mn}$，$_{e}HE_{mn}$，$_{o}EH_{mn}$ 和 $_{e}EH_{mn}$。其中角标"o"意思为奇，"e"意为偶。椭圆形芯层光纤有两个有零截止频率基模：$_{o}HE_{11}$ 和 $_{e}HE_{11}$。两个基模都是正交偏振模。偶模的横向电场分量平行于椭圆的短半轴，而奇模的横线电场平行于长半轴。两个基模的传播常数不同。因此，椭圆形光纤可以导引偏振光。更多有关椭圆形光纤的介绍请参考参考文献［156］。

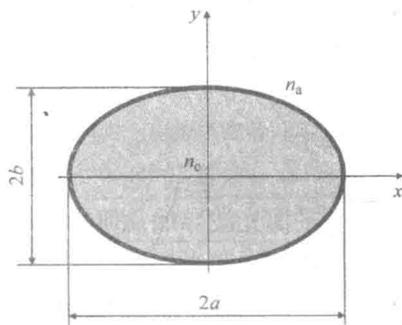


图 3.13 阶梯折射率椭圆光纤

为了提升阶梯折射率圆光纤的色散特性，出现了多阶梯圆光纤。在一个多阶梯圆光纤中，芯层被多个不同宽度和折射率的环结构包裹（如图 3.14 所示）。如果多阶梯圆光纤的芯层介质为空气，则这个结构的光纤被称为空心光纤。如果这些环结构的折射率从低到高呈周期性变化，则这样的光纤称为布拉格光纤。与布拉格光纤类似，另一种在折射率分布上更灵活，结构更一般的光纤是 1D 光子晶体光纤。多阶梯圆光纤的光传播性质与折射率分布的大幅度变化相关。例如，一个多阶梯圆光纤可以具有宽波长范围和平坦色散特性[157]，而空心光纤可以实现长波低损耗[158]。最近，多阶梯圆光纤结构实现了所有电介质同轴光波导[159]。更多有关多阶梯折射率圆光纤的介绍请参考参考文献[152-154]。

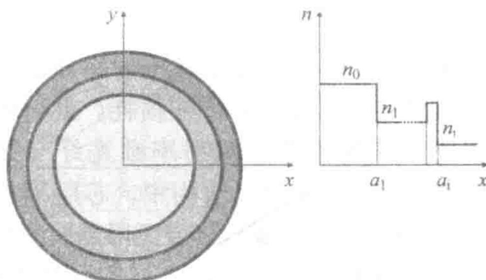


图 3.14 多阶梯圆光纤

最后，我们还要介绍各向异性光纤，其近年来多用于保偏性应用。这类光纤中最有名的光纤为"panda"和"Bow tie"光纤。这些光纤采用特种玻璃，引入一个机械应力，对材料产生光学各向异性。材料的光学各向异性会造成双折射现象，其定义为$(\beta_x-\beta_y)/k$。其中 β_x 和 β_y 分别为 x 和 y 偏振模的传播常数，k 为波数。有关各向异性光纤较详细的介绍，请参考 Noda 等人的参考文献[160]。

毫无疑问，MOF 可以在光学特性的设计上有更多的灵活性。众多使用 MOF 结构光纤的设计和实践研究都印证了这一点。最引人注目的一个例子可能是 Birks 等

的无限单模光纤[161]，截至到本书出版时，它已经被引用过2000次。Birks等人设计出这种光纤，它可以传输任意波长的单模光，这对标准阶梯折射率圆光纤是不可能实现的。

MOF最简单的例子是固态芯层光子晶体光纤（如图3.15所示）。该光纤通常在固态芯层外存在大量空气孔。空气孔通常组成三角形格子结构。孔为其他形状也是可以的。一般这些孔也是互相环绕的，而其他孔结构的光纤也是可行的。光子晶体光纤的光学性质与孔的尺寸和位置紧密相关。有关MOF的相对简单易懂的介绍可参考最近出版的书籍[162-164]。

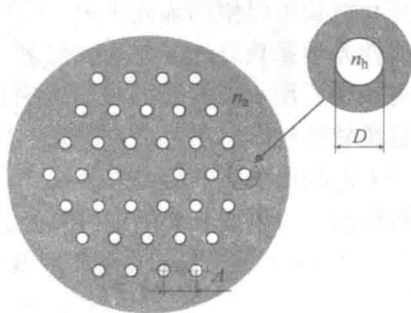


图3.15 光子晶体光纤

3.3.2 光纤实例

光纤应用的高速增长促进了材料科学领域的研究。制造光纤的材料可以分为两类：玻璃和树脂塑料。实际决定光纤采用何种材料的若干因素如下：

- 低价格；
- 可传导波长的衰减；
- 机械稳健性；
- 结构稳健性（抵抗结晶化）；
- 对环境因素影响（日光、空气、湿气）的抗性；
- 光学非线性性质；
- 光弯曲损耗；
- 光纤插拔特性；
- 掺杂镧系离子的能力。

硅玻璃是一种氧化玻璃，它也是当今在光纤制造中最常用的材料。这种材料非常稳健，价格低、插拔能力较高、弯曲损耗低、光学非线性相对较低，可以掺杂镧系离子。硅玻璃光纤主要作为长距离电信系统中的传输介质，也用于制造光纤激光器和放大器。硅玻璃光纤的一个主要局限性，是它的可传导波长的衰减较重，这是由于它的光子能量较高所致（$\sim 1100\text{cm}^{-1}$）。所以，其实际应用中的工作波长不能超过2μm。其他氧化玻璃可以在更长的波长应用中使用。例如，氧化锗玻璃的工作波长可以达到3μm。更长波长应用可以采用碲玻璃[165]。

非氧化玻璃主要用于中红外波长范围的应用。材料不含有氧离子可以减小光子能量。非氧化玻璃，如氟玻璃，特别要提到ZBLAN。氟玻璃最初用于长距离电信链路，以取代硅玻璃。不过，由于氟玻璃的稳健性明显低于硅玻璃，而其结晶化的

趋势也会增加玻璃衰减，所以这一想法很快被放弃。当时，氟玻璃的主要应用领域是工作在 3μm 的掺 Er^{3+} 激光器，以及 4μm 波长光束的接收。

ZBLAN 的光子能量为 ~650cm^{-1}。这表明这种玻璃可以用于超过 4μm 的应用中。更长波长可以使用硫族实现。硫玻璃的光子能量可以低至 ~350cm^{-1}。硫玻璃的非线性光学系数要比硅玻璃大很多，它也可以掺杂镧系离子[166]。

另一种可用于长波长的材料为卤化银，它是一种多晶材料。卤化银光纤不吸湿，且柔软性较好。不过，它的光学性质会因为日光曝射而逐渐劣化。卤化银光纤适用于 CO_2激光系统中的光束接收[167]。

树脂塑料主要用于光谱中可见光波段的光传输。树脂中对光子学特别重要的是 PMMA。树脂光纤易于施工且相对稳健性较好，因而越来越多的应用于光局域网[168]。

最新的有关红外波长范围玻璃光纤材料的概览请参考 Richardson 等人[169]和 Harrington[170]的著作。

图 3.16 所示为一些光纤的横截面示意。标准的芯 - 包层硅玻璃光纤如图 3.16a 所示[151]。它包含一个硅玻璃包层，和掺 GeO_2的硅玻璃芯层。掺杂其他材料可以改进硅玻璃性能，得到所需的光传播特性。图 3.16b 所示为硅玻璃基光子晶体光纤[161]。大量空气孔将光限制在芯层。改变孔的形状和尺寸可以改变光波导的性质。图 3.16c 所示为 panda 光纤[160]。和标准硅玻璃光纤相比，panda 光纤内另有两个 B_2O_3制成的侧线。这两条侧线形成一个机械应力，从而产生明显的双折射。玻璃芯层和空气包层间的大折射率差可以使芯层具有较大光强。图 3.16d 所示为悬置芯砷硒玻璃光纤[171]。另一种砷硒玻璃光纤是一种微结构光纤，如图 3.16e 所示[172]。在这种光纤中，光被七组低折射率的 $Ge_{10}As_{43.3}Se_{66.6}$侧线约束在芯区。图 3.16f 所示为一种芯区掺镱扩展模区域微结构光纤[173]。这类光纤一般用于光纤放大器。在信号光进入掺镱芯区时，外层由空气孔构成的环约束光产生泵浦。

对各不相同的光纤横截面计算其传播常数和模场分布，需要使用不同的建模方法。在下面的一节中，我们将从传统光纤开始，讨论这些方法，最终讨论 MOF 的建模。

3.3.3 阶梯折射率圆光纤

阶梯折射率圆光纤的场分布和传播常数可以由麦克斯韦方程的解析解求得。我们按照与平板波导相同的步骤推导这个解。我们首先求出芯区和包层的解，然后再用边界条件求出全区域的通解。

首先，对均质介质，方程（3.8c）和方程（3.8f）可以表示成霍尔姆兹方程形式：

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2}+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)E_z=0 \tag{3.41a}$$

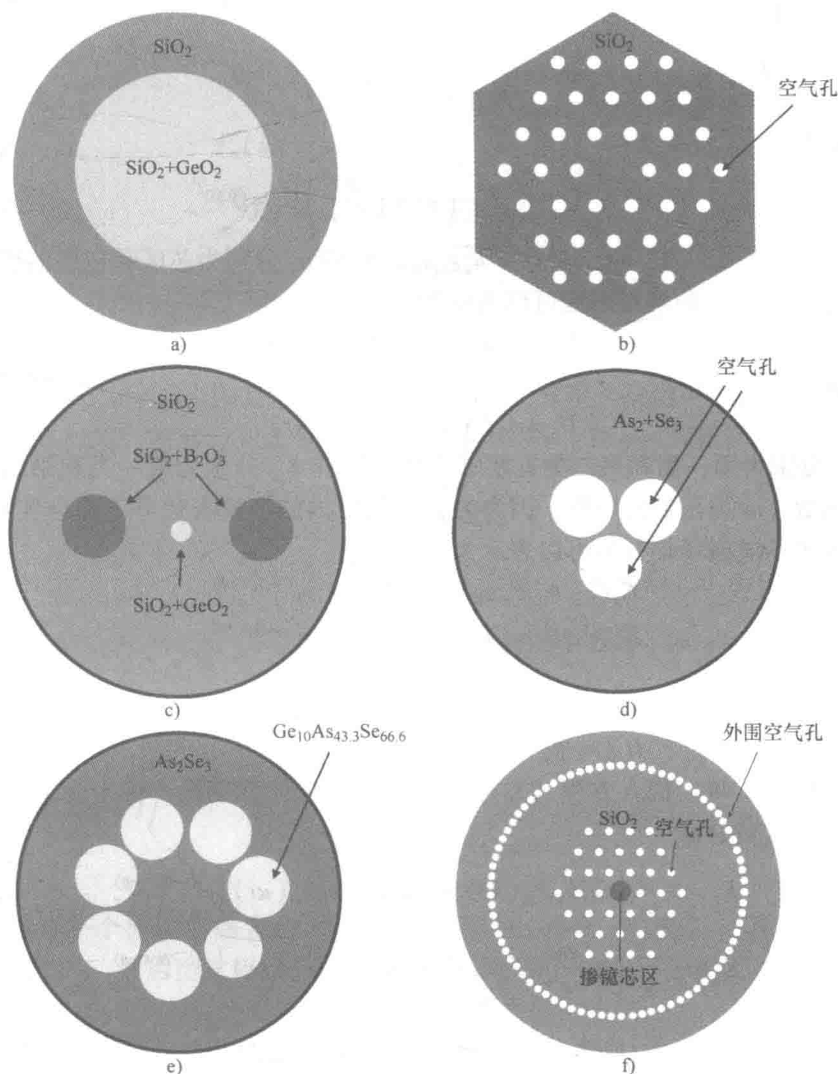


图3.16 为一些光纤的横截面示意

a）芯区－包层硅玻璃光纤 b）硅玻璃光子晶体光纤 c）PANDA 光纤 d）悬置芯砷硒玻璃光纤 e）微结构砷硒玻璃光纤 f）掺镱扩展模区域微结构光纤

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 H_z}{\partial y^2}+(\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta^2)H_z=0 \tag{3.41b}$$

我们可以将方程（3.41）改写为柱坐标形式，由圆的对称性，我们可以得到如下乘积形式的解：

$$U(r,\ \theta,\ z,\ \omega)=U(r,\ \omega)\mathrm{e}^{\mathrm{j}(-\beta z+m\theta)} \tag{3.42}$$

式中，U 代表了 E_z 和 H_z，$m\geqslant 0$ 为方位角模数。将方程（3.42）代入方程

(3.41)，可以得到柱坐标方程，对芯区，有

$$\frac{\partial^2 U_z}{\partial r^2}+\frac{\partial U_z}{r\partial r}+\left(\kappa^2-\left(\frac{m}{r}\right)^2\right)U_z=0 \tag{3.43a}$$

对包层，有

$$\frac{\partial^2 U_z}{\partial r^2}+\frac{\partial U_z}{r\partial r}-\left(\gamma^2+\left(\frac{m}{r}\right)^2\right)U_z=0 \tag{3.43b}$$

其中 $\kappa^2=\omega^2 n_c^2\varepsilon_0\mu_0-\beta^2$，$\gamma^2=\beta^2-\omega^2 n_a^2\varepsilon_0\mu_0$，$n_c$ 和 n_a 分别为芯区和包层的折射率。

方程（3.43）的解在芯区可以表示为

$$U_z=A_1J_m(\kappa r)+A_2Y_m(\kappa r)$$

在包层为

$$U_z=A_3I_m(\gamma r)+A_4K_m(\gamma r)$$

J_m 和 Y_m 分别为第一类和第二类贝塞尔函数，I_m 和 K_m 分别为第一类和第二类修正贝塞尔函数，m 为函数的阶数。因为芯区和包层内的场没有边界不符合实际情况，所以芯区内的电磁场轴分量可以表示为

$$E_z(r,\theta,z,\omega)=A_EJ_m(\kappa r)e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.44a}$$

$$H_z(r,\theta,z,\omega)=A_HJ_m(\kappa r)e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.44b}$$

对包层，有

$$E_z(r,\theta,z,\omega)=B_EK_m(\gamma r)e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.44c}$$

$$H_z(r,\theta,z,\omega)=B_HK_m(\gamma r)e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.44d}$$

通过将方程（3.44）代入方程（3.1），再经过若干代数变换，柱坐标下芯层横向电磁场分量可表示为

$$E_r=-\frac{j}{\kappa^2}\left[\beta\kappa A_EJ'_m(\kappa r)+j\omega\mu_0\frac{m}{r}A_HJ_m(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45a}$$

$$E_\theta=-\frac{j}{\kappa^2}\left[j\beta\frac{m}{r}A_EJ_m(\kappa r)-\omega\mu_0\kappa A_HJ'_m(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45b}$$

$$H_r=-\frac{j}{\kappa^2}\left[\beta\kappa A_HJ'_m(\kappa r)-j\omega\varepsilon_0n_c^2\frac{m}{r}A_EJ_m(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45c}$$

$$H_\theta=-\frac{j}{\kappa^2}\left[j\beta\frac{m}{r}A_HJ_m(\kappa r)+\omega\varepsilon_0n_c^2\kappa A_EJ'_m(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45d}$$

包层：

$$E_r=\frac{j}{\gamma^2}\left[\beta\gamma B_EK'_m(\gamma r)+j\omega\mu_0\frac{m}{r}B_HK_m(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45e}$$

$$E_\theta=\frac{j}{\gamma^2}\left[j\beta\frac{m}{r}B_EK_m(\gamma r)-\omega\mu_0\gamma B_HK'_m(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45f}$$

$$H_r=\frac{j}{\gamma^2}\left[\beta\gamma B_HK'_m(\gamma r)-j\omega\varepsilon_0n_a^2\frac{m}{r}B_EK_m(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45g}$$

$$H_\theta=\frac{j}{\gamma^2}\left[j\beta\frac{m}{r}B_HK_m(\gamma r)+\omega\varepsilon_0n_a^2\gamma B_EK'_m(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.45h}$$

其中“撇号”代表了函数求导。考虑电磁场正切分量在芯区-包层边界上的连续性，$r=a$，可以得到四元代数方程组：

$$\begin{bmatrix} J_m(u) & 0 & -K_m(w) & 0 \\ 0 & J_m(u) & 0 & -K_m(w) \\ j\frac{\beta m}{a\kappa^2}J_m(u) & +\frac{\omega\mu_0}{\kappa}J'_m(u) & j\beta\frac{m}{a\gamma^2}K_m(w) & +\frac{\omega\mu_0}{\gamma}K'_m(w) \\ \frac{\omega\varepsilon_0}{\kappa}n_c^2J'_m(u) & -j\frac{\beta m}{a\kappa^2}J_m(u) & +\frac{\omega\varepsilon_0}{\gamma}n_a^2K'_m(w) & -j\beta\frac{m}{a\gamma^2}K_m(w) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_E \\ A_H \\ B_E \\ B_H \end{bmatrix}=0 \tag{3.46}$$

其中，$u=\kappa a$，$w=\gamma a$。因为方程（3.46）为齐次方程，我们可以按照与平板波导相同的办法处理，将其行列式等于零，得到 Hondros - Debye 方程：

$$(X_m+Y_m)(n_c^2Y_m+n_a^2X_m)-\frac{m^2N^2}{(u^2B)^2}=0 \tag{3.47}$$

其中 $X_m=\frac{K'_m(w)}{wK_m(w)}$，$Y_m=\frac{J'_m(u)}{uJ_m(u)}$，$B=\frac{N^2-n_a^2}{n_c^2-n_a^2}$是相对传播常数，$N=\beta/k$ 是有效折射率，k 是波数。对 $m=0$，方程（3.47）可以分为两个方程，求 TE 模传播常数的方程为

$$\frac{J_1(u)}{uJ_0(u)}+\frac{K_1(w)}{wK_0(w)}=0 \tag{3.48a}$$

求 TM 模的方程为

$$n_c^2\frac{J_1(u)}{uJ_0(u)}+n_a^2\frac{K_1(w)}{wK_0(w)}=0 \tag{3.48b}$$

在求出一个模的传播常数之后，我们可以由方程（3.46）计算未知常数 A_E，A_H，B_E 和 B_H，然后由方程（3.44）和方程（3.45）求出场分布。算法3.3 总结了求 Hondros - Debye 方程的根计算阶梯折射率圆光纤的步骤：

算法3.3　求式（3.47）零点计算阶梯折射率圆光纤的传播常数

1. 开始；
2. 设置波长、折射率、波导厚度，和模阶数值；
3. 求式（3.46）的零点计算传播常数；
4. 由对半法优化传播常数值；
5. 停止。

```
% program calculates normalised propagation constant for step
% index
% optical fibres
format long e
% fibre definition
```

```
lambda = 1.55;
radius = 7.5;
na = 1.46;
nc = 1.47;
m = 1;

% calculation parameters
k = 2.0*pi/lambda;
V = radius*k*sqrt(nc^2-na^2);
B = (0.05:0.00001:0.975);

% Hondros-Debye equation
HD = hdf(m,nc,na,V,B);
zero = 0.*B;
plot(B,HD,B,zero)

% precise initial location of B
length = size(B);
for j = length(2):-1:2
if HD(j)/HD(j-1)<0
break
end
end
if j = =2
disp('no zero found, change initial interval')
disp('the results are incorrect')
end

btop = B(j);
bbot = B(j-1);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%

% bisection method for root finding starting from the initial
% interval
DEtop = hdf(m,nc,na,V,btop);
DEbot = hdf(m,nc,na,V,bbot);
jmax = 100;  % maximum number of bisections
tolerance = 0.000000000001;       % tolerance for finding B

for j = 1:jmax
bcen = (btop-bbot)/2+bbot;
DEcen = hdf(m,nc,na,V,bcen);
if DEtop/DEcen > 0
btop = bcen;
DEtop = DEcen;
else
bbot = bcen;
DEbot = DEcen;
end
```

```
delta = btop-bbot;
if delta < tolerance
break
end
end
%end of bisection method loop
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%
% checks for tolerance
if j = =jmax
disp('maximum number of bisections exceeded')
else
out = bcen;
end
% variable 'out' stores the relative propagation constant B

% calculation of effective index
nin = abs(sqrt(out*(nc*nc-na*na)+na*na))

function HDebye = hdf(m,nc,na,V,B)
% Hondros Debye equation evaluation
w = sqrt(B)*V;
u = sqrt(1-B)*V;
N2 = B*(nc^2-na^2)+na^2;

Jminus = besselj(m-1,u)./(u.*besselj(m,u));
Jplus = besselj(m+1,u)./(u.*besselj(m,u));
Kminus = besselk(m-1,w)./(w.*besselk(m,w));
Kplus = besselk(m+1,w)./(w.*besselk(m,w));
X1 = -0.5*(Kminus+Kplus);
Y1 = 0.5*(Jminus-Jplus);
HDebye = (X1+Y1).*(nc^2*Y1+na^2*X1)-m*m*N2./((u.^2.*B).^2);
```

根据 MATLAB 编程流程，我们将程序储存为 hdf. m 文件。我们用下式对给定β评估方程（3.46）：

$$X_m = -\frac{1}{2}(K^- + K^+),\ Y_m = \frac{1}{2}(J^- - J^+),\ \text{其中}\ J^\pm = \frac{J_{m\pm1}(u)}{uJ_m(u)},\ K^\pm = \frac{K_{m\pm1}(w)}{wK_m(w)}$$

与平板波导不同，方程（3.46）会得到不止一个零点，函数描点可以帮助我们确定传播常数。我们用这个程序计算基模 HE11 和 TE01，光纤半径 $a = 7.5\mu m$，工作波长为 $1.55\mu m$ 时，$n_c = 1.47$，$n_a = 1.46$。求得芯区和包层的传播常数分别为 $5.9528599309\mu m^{-1}$ 和 $5.9438095599\mu m^{-1}$[111]。对双包层和多层光纤用解析法求解方程（3.41），可以参考 Majewski 等人的文献［9］。除此以外，用标准数值方法，如 FEM 或 FDM 也可以求解方程（3.41）。高阶有限差分逼近法的相关介绍可以参考 Du 和 Chiou[174] 以及 Lu 等人的著作[175]。

现在，我们用标量近似法求阶梯折射率光纤。首先，我们先将方程（3.15）

改写为柱坐标形式，并带入乘积形式的解：

$$U(r,\ \theta,\ z,\ \omega)=\widetilde{U}(r)\mathrm{e}^{\mathrm{j}(-\beta z+l\theta)} \tag{3.49}$$

得到芯区表达式：

$$\frac{\partial^2\widetilde{U}}{\partial r^2}+\frac{\partial\widetilde{U}}{r\partial r}+\left(\kappa^2-\left(\frac{m}{r}\right)^2\right)\widetilde{U}=0 \tag{3.50a}$$

和包层表达式：

$$\frac{\partial^2\widetilde{U}}{\partial r^2}+\frac{\partial\widetilde{U}}{r\partial r}-\left(\gamma^2+\left(\frac{m}{r}\right)^2\right)\widetilde{U}=0 \tag{3.50b}$$

其中，$\kappa^2=\omega^2n_c^2\varepsilon_0\mu_0-\beta^2$，$\gamma^2=\beta^2-\omega^2n_a^2\varepsilon_0\mu_0$，$n_c$ 和 n_a 分别是芯区和包层的折射率。同样，如方程（3.43）一样，我们用标量位势表示芯区：

$$\widetilde{U}(r,\ \theta,\ z,\ \omega)=AJ_1(\kappa r)\mathrm{e}^{\mathrm{j}(-\beta z+l\theta)} \tag{3.51a}$$

以及包层：

$$\widetilde{U}(r,\ \theta,\ z,\ \omega)=BK_1(\gamma r)\mathrm{e}^{\mathrm{j}(-\beta z+l\theta)} \tag{3.51b}$$

考虑标量位势及其微分在芯区和包层边界的连续性，我们可以得到一个二元代数方程组：

$$\begin{bmatrix} J_1(u) & -K_1(w) \\ uJ'_1(u) & -wK'_1(w) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}=0 \tag{3.52}$$

由行列式计算可得：

$$\frac{uJ_{1+1}(u)}{J_1(u)}=\frac{wK_{1+1}(w)}{K_1(w)} \tag{3.53}$$

方程（3.53）的解为标量近似法的模传播常数。由方程（3.51）代入方程（3.52）可以得到相应的场分布。

标量近似法可以求出 $l=0$ 的基模传播常数。表 3.12 和表 3.13 对比了矢量色散方程（3.47）和标量色散方程（3.53）求出的基模归一化传播常数。结果置信误差小于 5×10^{-7}。

$$B=\frac{\beta^2-n_a^2k^2}{n_c^2k^2-n_a^2k^2}$$

表 3.12 为 $n_a=1.46$，$n_c=1.47$，$\lambda=1.55\mu\mathrm{m}$，芯区半径可变的光纤计算结果。相对误差定义为

$$\Delta=\frac{|B_{sc}-B_{vec}|}{B_{vec}}$$

式中，B_{sc}和 B_{vec}分别为标量法和向量法得到的相对传播常数。从表 3.12 可以看出，标量和向量法的差异随着芯区半径增加而减小，即，距截至模越远，差异越小。表 3.13 为芯区折射率可变光纤的相对传播常数值，$n_c=1.47$，$\lambda=1.55\mu\mathrm{m}$，$V=ak\sqrt{n_c^2-n_a^2}$。这些结果显示，随着芯区和包层折射率比变大，标量和向量结果的差别

也逐渐增大。

重要的一点是，方程（3.53）与线偏振（LP）模的色散方程相同[176]。不过，需要注意不要将标量近似与LP近似混淆。两者都只在芯区－包层折射率比较小时才有效。而且，虽然两者的色散方程相同，但标量近似法求解的是标量波动方程，而LP模是由求解麦克斯韦方程得到的。标量模的场分布由标量位势得到，而LP模的场分布是电磁场的某一分量的分布[176]。

同时，也要将LP模和“光波导理论导论”里推导的方程（3.14）极化近似法的结果相区分。实际上，极化近似法计算基模HE_{11}的传播常数会略精确一些。不过，它一般无法计算高阶模的传播常数[102]。

表3.12　圆单模阶梯折射率光纤的基模归一化传播常数

（$n_c=1.47$，$n_a=1.46$，$\lambda=1.55\mu m$，见表3.12）

$a/\mu m$	B 向量3.46	B 标量3.52	相对差
1.5	0.05115	0.05229	2.2e－002
2.5	0.32061	0.32273	6.6e－003
3.5	0.53550	0.53702	2.8e－003
4.5	0.66974	0.67074	1.5e－003
5.5	0.75495	0.75562	8.8e－004
6.5	0.81153	0.81199	5.7e－004

表3.13　圆单模阶梯折射率光纤的基模归一化传播常数

（$V=2.4$，$n_c=1.47$，$\lambda=1.55\mu m$，见表3.12）

n_a	B 向量3.46	B 向量3.52	相对差
1.45	0.52691	0.53003	5.9e－003
1.4	0.51882	0.53003	2.2e－002
1.3	0.50126	0.53003	5.7e－002
1.2	0.48171	0.53003	1.0e－001
1.1	0.45996	0.53003	1.5e－001
1.0	0.43582	0.53003	2.3e－001

为了理清LP和标量模的区别，我们下面推导LP_{01}模的场分布和色散方程。LP_{01}模的场分布可由弱导引近似条件，即$n_c\approx n_a$下HE_{11}模的场分布求得。将$B_H=1$代入方程（3.46）可得：

$$B_E=\frac{1}{j}\frac{\omega\mu_0}{\beta m}Bu^2(X_m+Y_m) \tag{3.54a}$$

$$A_E = \frac{1}{j}\frac{\omega\mu_0}{\beta m}Bu^2(X_m + Y_m)A_H \tag{3.54b}$$

$$A_H = \frac{K_m(w)}{J_m(u)} \tag{3.54c}$$

将式（3.54）代入式（3.56），并由贝塞尔函数恒等式[177]可得芯区：

$$E_r = \frac{A_H}{\kappa}\omega\mu_0\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}+1\right)J_{m+1}(\kappa r) + \frac{1}{2}\left(-\frac{C}{m}+1\right)J_{m-1}(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55a}$$

$$E_\theta = -\frac{jA_H}{\kappa}\omega\mu_0\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}+1\right)J_{m+1}(\kappa r) + \frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}-1\right)J_{m-1}(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55b}$$

$$H_r = -\frac{jA_H}{\kappa}\beta\left[\frac{1}{2}\left(-\left(\frac{n_c}{N}\right)^2\frac{C}{m}-1\right)J_{m+1}(\kappa r) + \frac{1}{2}\left(-\left(\frac{n_c}{N}\right)^2\frac{C}{m}+1\right)J_{m-1}(\kappa r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55c}$$

$$H_\theta = \frac{A_H}{\kappa}\beta\left[\frac{1}{2}\left(\left(\frac{n_c}{N}\right)^2\frac{C}{m}+1\right)J_{m+1}(\kappa r) + \frac{1}{2}\left(-\left(\frac{n_c}{N}\right)^2\frac{C}{m}+1\right)J_{m-1}(\kappa r)\right] \tag{3.55d}$$

包层：

$$E_r = -\frac{\omega\mu_0}{\gamma}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}+1\right)K_{m+1}(\gamma r) + \frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}-1\right)K_{m-1}(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55e}$$

$$E_\theta = \frac{j\omega\mu_0}{\gamma}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{C}{m}+1\right)K_{m+1}(\gamma r) + \frac{1}{2}\left(-\frac{C}{m}+1\right)K_{m-1}(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55f}$$

$$H_r = \frac{j\beta}{\gamma}\left[\frac{1}{2}\left(-\left(\frac{n_a}{N}\right)^2\frac{C}{m}-1\right)K_{m+1}(\gamma r) + \frac{1}{2}\left(\left(\frac{n_a}{N}\right)^2\frac{C}{m}-1\right)K_{m-1}(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55g}$$

$$H_\theta = -\frac{\beta}{\gamma}\left[\frac{1}{2}\left(\left(\frac{n_a}{N}\right)^2\frac{C}{m}+1\right)K_{m+1}(\gamma r) + \frac{1}{2}\left(\left(\frac{n_a}{N}\right)^2\frac{C}{m}-1\right)K_{m-1}(\gamma r)\right]e^{j(-\beta z+m\theta)} \tag{3.55h}$$

其中 $C = Bu^2(X_m + Y_m)$。将 $m=1$ 代入式（3.55），假设 $n_a \approx n_c \approx N$，计算在 $z=0$ 的横向场分量 x 和 y，可得对芯区有

$$E_x = -j\frac{A_H}{\kappa}\omega\mu_0 J_0(\kappa r) \tag{3.56a}$$

$$E_y = 0 \tag{3.56b}$$

$$H_x = 0 \tag{3.56c}$$

$$H_y = -j\frac{A_H}{\kappa}\beta J_0(\kappa r) \tag{3.56d}$$

对包层有：

$$E_x = -\mathrm{j}\frac{\omega\mu_0}{\gamma}K_0(\gamma r) \tag{3.56e}$$

$$E_y = 0 \tag{3.56f}$$

$$H_x = 0 \tag{3.56g}$$

$$H_y = -\mathrm{j}\frac{\beta}{\gamma}K_0(\gamma r) \tag{3.56h}$$

式（3.56）显示，在弱导引近似条件下，基模的分布为线性偏振。同时还可以注意到，横向电场和横向磁场向量幅度的比为

$$Z = \frac{E_r}{H_y} = \frac{\omega\mu_0}{\beta} \approx \frac{1}{n_c}\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \approx \frac{1}{n_a}\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \tag{3.57}$$

弱导引近似最初由 Gloge[178] 提出，并成功的解释了实验中观察到的硅玻璃光纤模图形。高阶 LP 模的场分布推导可以参考 Majewski 和 Sujecki[9] 以及 Yariv[176] 等文献。

与平面平板波导类似，解析法也可以推导出阶梯折射率光纤的辐射模诸表达式[40]。有关漏泄波以及复模的更多介绍，请参考 Rozzi 和 Mongiardo[41] 以及 Snyder 和 Love[55]、Jablonski[58] 等文献。

3.3.4 用"穷人法"建模 MOF

参考文献［179］提出了一种特殊的数值方法对 MOF 建模。它基于标量近似和有限差分法。在标量近似法中，光波导的模可由方程（3.17）解出。如果用三点有限差分近似法[49] 求解两个二阶偏微分，由方程（3.17），对点（x_i，y_j），五个标量位势 $\varphi_{i,j}$ 采样有如下方程式：

$$\frac{\phi_{i-1,j}-2\phi_{i,j}+\phi_{i+1,j}}{h_x^2}+\frac{\phi_{i,j-1}-2\phi_{i,j}+\phi_{i,j+1}}{h_y^2}+n_i^2k^2\phi_{i,j}=\beta^2\phi_{i,j}$$

对所求区域内每个点列出相似的方程，考虑边界条件并将所有方程联立，可得到一个 β^2 的代数特征值问题：

$$A\,\overline{\phi} = \beta^2\,\overline{\phi} \tag{3.58}$$

式中，$\overline{\phi}$ 为集合所有标量位势采样的向量；A 为一个实五对角对称矩阵，它的特征值可以用标准数值方法轻松求出。

考虑一个一般的微结构光纤，可以发现其折射率分布存在若干对称面，可以减少计算域的大小。例如，一个等边三角形网格的微结构光纤有六个对称面，有六重旋转轴。这些对称性质在矩形坐标系内无法全部使用，但在柱坐标系内，或者通过使用六边形有限差分网格，则可以发挥这些对称性的优势，以减少计算窗口的大小。例如，在矩形坐标系内，等边网格微结构光纤的最小计算窗口为一个象限（如图 3.17a 所示），而在柱坐标系内为 30°区域（如图 3.17b 所示）。

在柱坐标系，标量波动方程（3.15）为如下形式：

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{\partial\phi}{r\partial r}+\frac{1}{r^2}\ \frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}+(k^2-\beta^2)\phi=0 \tag{3.59}$$

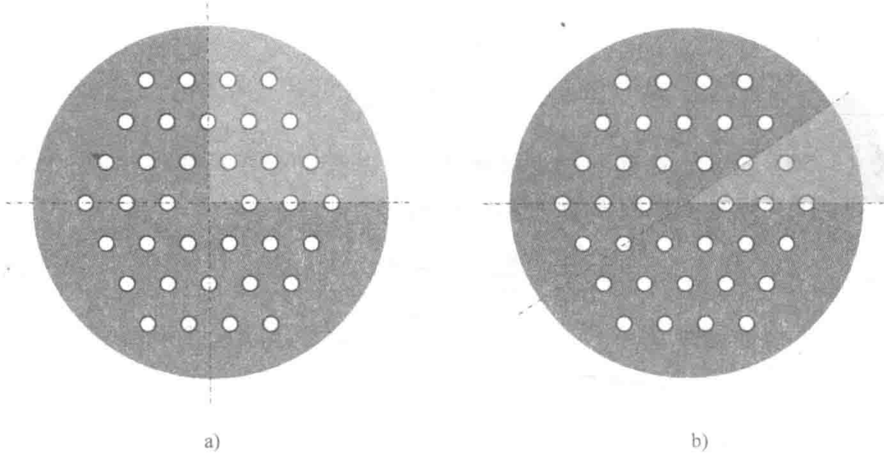


图 3.17 微结构光纤的等边三角形计算窗口在不同坐标系的表示
a）直角坐标系 b）柱面坐标系

算法 3.4 柱坐标系下标量有限差分法计算微结构光纤的传播常数

1. 开始；
2. 设置有限差分网格；
3. 设置波长；
4. 设置折射率；
5. 组建有限差分系数矩阵；
6. 求解特征值问题；
7. 选择所求模对应的特征值和特征向量；
8. 画出模分布图；
9. 停止。

柱坐标系下，用标准三点有限差分近似求解二阶偏微分，并用两点中心差分近似求解一阶微分，带入方程（3.59），可得在点（x_i，y_j）处，标量位势 $\phi_{i,j}$的五个采样点有如下方程：

$$\frac{\phi_{i-1,j}-2\phi_{i,j}+\phi_{i+1,j}}{h_r^2}+\frac{\phi_{i,j-1}-\phi_{i,j}}{2r_{i,j}h_r}+\frac{\phi_{i,j-1}-2\phi_{i,j}+\phi_{i,j+1}}{r_{i,j}^2h_\theta^2}+n_i^2k^2\phi_{i,j}=\beta^2\phi_{i,j}$$

同矩形坐标系的情况，如果在所求计算域，将所有采样点的有限差分方程联立在一起，可以得到一个有关 β^2 的特征值问题。Smith[49] 描述了如何处理 $r=0$ 节点。算法 3.4 总结了用有限差分法求解微结构光纤标量波动方程的主要步骤。

以下为算法3.4计算MOF传播常数的MATLAB脚本。

```
% program calculates propagation constants of MOF,
% cylindrical c.s.
% boundary conditions: zero field on external border and
% zero normal derivative on symmetry plane
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e
% initial constants
I = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;

wavelength = 1.5;% wavelength [mi]
k0 = 2*pi/wavelength;
ref_in_ba = 1.45;% background ref index
ref_in_ho = 1.;% hole ref index
hole_rad = 2;% hole radius [mi]
LAM = 10.;% lattice constant [mi]
PC_first_lay = 2;% first layer index
PC_no_lay = 9;
% number of PC hole layers (so if first = 2, no_lay = 4 then
% the last PC hole layer is no 5)

boundary_condition = 1;
%boundary condition = 0 - zero field on x axis;
%boundary condition = 1-zero derivative on x axis
shift = k0*1.4488;

% mesh params
window_radius = 30;%window radius [mi]
dr =.2;% radial mesh size [mi]
window_angle = pi/6;%window angle [rad]
dt = window_angle/150;
% angular mesh size [rad]-denominator gives the
%number of nodes on the arc
no_nodes_r = round(window_radius/dr);
% number of nodes in x direction
%(the x waveguide dimension = dx*n_nodes_x*2)
no_nodes_t = round(window_angle/dt);
% number of nodes in y direction
%(the y waveguide dimension = dx*n_nodes_x*sqrt(3)*2)
% - in y direction %we do not count shifted nodes
no_nodes = no_nodes_r*no_nodes_t;%total number of nodes
```

```
%creating a complex matrix with mesh node positions
%x-real part, y-imaginary part
%as the origin of the coordinate system is placed in
%the centre of symmetry and we consider only one quater
%the refernece point is 0+I*0
FD_radius = 0.5*dr:dr:window_radius;
%vector storing radial positions
FD_angle = 0.5*dt:dt:window_angle;
%vector storing angular positions
FD_mesh = ones(no_nodes,1);
%matrix storing node positions row wise

for j1 = 1:no_nodes_r
    for j2 = 1:no_nodes_t
        FD_mesh((j1-1)*no_nodes_r+j2) = FD_radius(j1)*...
        exp(I*FD_angle(j2));
    end
end

% calculating the lattice nodes positions (first part)
loop_count = 1;
for j1 = PC_first_lay:PC_no_lay+PC_first_lay-1
    for j2 = 1:j1
        PC_mesh(loop_count) = (j1-1)*LAM-(j2-1)*LAM/2+...
        I*(j2-1)*LAM*sqrt(3)/2;
        loop_count = loop_count+1;
    end
end


% calculating the lattice nodes positions
% (rotated by 60 deg part)
for j1 = PC_first_lay:PC_no_lay+PC_first_lay-1
    for j2 = 1:j1
        PC_mesh(loop_count) = ((j1-1)*LAM-(j2-1)*LAM/2+...
        I*(j2-1)*LAM*sqrt(3)/2)*exp(I*pi/3);
        loop_count = loop_count+1;
    end
end
PC_no_nodes = loop_count-1;
'finished calculating lattice positions'

% creating refractive index map in the mesh nodes
ref_in = ref_in_ba*ones(no_nodes,1);
%matrix storing refractive indices%in nodes.
%It is initiated to background ref index
for j1 = 1:no_nodes
    test_con = 1;
    j2 = 1;
    while test_con
        if abs(FD_mesh(j1)-PC_mesh(j2)) < hole_rad
```

```
            ref_in(j1) = ref_in_ho;
            test_con = 0;
         end
         j2 = j2+1;
         if j2 > PC_no_nodes
            test_con = 0;
         end
     end
end
'set ref index values'

%setting up the matrix
FD_matrix1 = zeros(no_nodes,5);
%reserving space for complex matrix with
%FD coefficients

%setting the initial pattern
loop_count = 1;
for j1 = 1:no_nodes_r
    for j2 = 1:no_nodes_t
        FD_matrix1(loop_count,2) =...
        1/(dt*dt*FD_radius(j1)*FD_radius(j1));
        FD_matrix1(loop_count,3) = -2/(dr*dr)-...
        2/(dt*dt*FD_radius(j1)*FD_radius(j1))+...
        k0*k0*ref_in(loop_count)*ref_in(loop_count)-...
        shift*shift;
        FD_matrix1(loop_count,4) =...
        1/(dt*dt*FD_radius(j1)*FD_radius(j1));
        FD_matrix1(loop_count,1) =...
        1/(dr*dr)-1/(2*dr*FD_radius(j1));
        FD_matrix1(loop_count,5) =...
        1/(dr*dr)+1/(2*dr*FD_radius(j1));
        loop_count = loop_count+1;
    end
end

% adding periodic features
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
loop_count = 1;
for j1 = 1:no_nodes_r
    FD_matrix1(loop_count,3)=FD_matrix1(loop_count,3)+...
    FD_matrix1(loop_count,2);
    FD_matrix1(loop_count+no_nodes_t-1,3)=...
    FD_matrix1(loop_count+no_nodes_t-1,3)+...
    FD_matrix1(loop_count+no_nodes_t-1,4);
    loop_count = loop_count+no_nodes_t;
end

%including zero field option
if abs(boundary_condition)<1.d-16
    'boundary zero field'
```

```
    loop_count = 1;
    for j1 = 1:no_nodes_r
        FD_matrix1(loop_count,3) =…
        FD_matrix1(loop_count,3)-…
        2*FD_matrix1(loop_count,2);
        %FD_matrix1(loop_count,1) = 0 so omitted
        loop_count = loop_count+no_nodes_t;
    end
end

% setting zeros in off diagonals
loop_count = 1;
for j1 = 1:no_nodes_r-1
    FD_matrix1(loop_count+no_nodes_t,2) = 0;
    FD_matrix1(loop_count+no_nodes_t-1,4) = 0;
    loop_count = loop_count+no_nodes_t;
end


%initial matrix created
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%shifting columns for fitting spdiag format
FD_matrix1(:,1) = circshift(FD_matrix1(:,1),-no_nodes_t);
FD_matrix1(:,2) = circshift(FD_matrix1(:,2),-1);
FD_matrix1(:,4) = circshift(FD_matrix1(:,4),1);
FD_matrix1(:,5) = circshift(FD_matrix1(:,5),no_nodes_t);
%
FD_matrix2 = spdiags(FD_matrix1, …
[-no_nodes_t -1 0 1 no_nodes_t], no_nodes, no_nodes);

'started calculating eigenvalues'
%calculating eigenvalues and plotting
aug = ones(no_nodes,1);%augmented vector
augp = ones(no_nodes,1);
%augmented vector after forward substitution

tol =.05e-1;
maxit = 150;
droptol = 0.0001;
[L,U] = luinc(FD_matrix2,droptol);
'finished ilu'
for i = 1:8
    x0 = aug;
    augp = aug;
    aug = bicgstab(FD_matrix2,aug,tol,maxit,L,U,x0);
    eigenval = (aug'*augp)/(aug'*aug);
    [i,eigenval,sqrt(eigenval+shift*shift)/k0]
end
```

平移反幂法可以计算特征值[50]。平移量和有效折射率有关，它的取值需要接近模的有效折射率，以使幂法可以快速收敛。不过，如果平移值过分接近模的有效折射率，则会造成系数矩阵退化，而造成矩阵求逆的 BICGSTAB 法较难收敛。因此，这个合适的值需要“反复试错”才能找到。注意，反幂法没有收敛性检验。使用者需要比较迭代序列中的有效折射率值的变化，来判断是否收敛。在代码中可以看到，对计算对象的光纤结构，我们选取平移量为 1.4488。光纤为硅玻璃材质，上面有孔构成的三角形网格。网格常数为 10μm，孔的半径为 2μm。工作波长为 1.5μm。变量“Window_radius”和“Window_angle”设置计算窗口的大小。在上一个程序中，这两个参数分别为 30μm 和 π/6。在计算窗口边缘，假设场为零。对计算对象，30μm 半径足够大，有效折射率对以上计算窗口边缘假设的影响可忽略不计。图 3.18 所示为基模有效折射率与径向 FD 网格常数 h_r的关系。沿着方位角方向的网格节点数等于沿着径向的网格节点数。结果和六边形网格标量有限差分法的结果进行了[180]。图中还画出了后一种方法的结果与网格常数 h_h的关系。两种方法收敛结果至少有五个小数位是一致的。

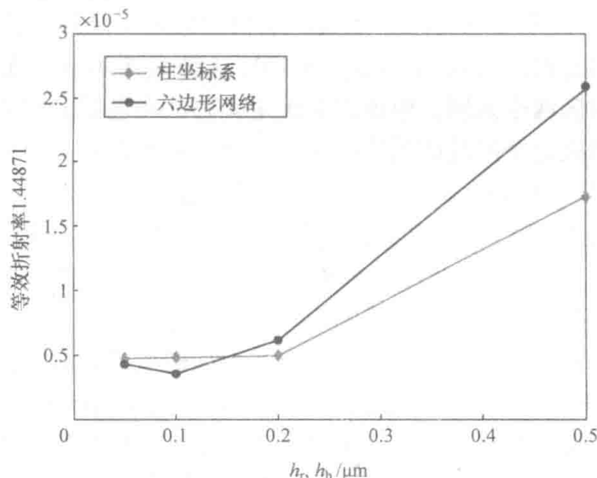


图 3.18　微结构光纤（MOF）计算中有限差分网格尺寸和有效折射率之间的关系，柱形空气孔的三角形网格常数为 10μm，空气孔直径为 2μm，工作波长为 1.5μm，在中心的孔缺失，形成缺陷

标量有限差分法，虽然实现和应用相对简单，但是却存在标量近似的缺点。因为很多实际的 MOF 都存在折射率中断不连续的情况，例如在硅玻璃和空气界面，所以这个问题相对严重。通过向量修正可以提高标量有限差分法的实用性[181]。但大多数情况，还是需要使用向量法。

3.3.5　MOF 的传播常数计算

原理上，大多数能用于计算平面光波导传播特性的数值分析方法，都可以用于计算 MOF。因此，MOF 的计算方法很多都源自集成光学领域。它尤其适和

FEM[182-184]和FDM[114,185-188]。在直接使用这些方法上存在的主要问题，是MOF交界面边界处，如玻璃和空气界面上，折射率值的显著变化。而平面器件模的求解使用阶梯近似，这种方法在折射率不连续的附近会出现不符合物理常识的伪解。因此，在用有限元或有限差分法处理MOF时，需要做一些调整。同时，这些调整可以更灵活的处理曲面界面，例如，FEM的曲线元[189]，或者FD的折射率平均[190]。通常，FEM和FDM的稳健性很好，可以应用于任何实际的MOF。但这两种方法都有计算效率较低的局限。

为了克服FEM和FDM的缺陷，出现了若干种可以提高MOF设计开发速度的解析方法。与平面光波导类似，有效折射率法（EIM）应用广泛。一般对MOF，可以使用两种EIM。我们将以图3.16中的MOF结构为例，讨论两种方法的差异。第一种方法，假设芯区与标准阶梯折射率光纤相同，其他区域为从芯区延展出来的光子晶体结构。芯区有效折射率假设等于芯区材料的折射率，而光子晶体区的有效折射率，等于无限延展的，即忽略芯区（缺陷）的，光子晶体的基模的有效折射率[191,192]。求解后一种有效折射率很复杂，需要用向量数值法。因此，在Li等人的文献[193]中提出了一种简单方法，用圆形晶格近似光子晶体的晶格单元，并用一种简单的解析表达式得出有效折射率。该EIM法的主要难点，在于光纤分成了芯区和光子晶体包层区两个区域，但难以明确定义芯区和包层的边界。很多研究者试图找到一种可以解决这个问题的最优办法，但是可以想象到，这些解法只能针对众多MOF类型中的某一小类。其他EIM方法并不存在这个问题。它们将MOF（见图3.16）的横截面分为芯区和一组同心环[194]。每一个环的有效折射率都沿着方向角方向计算。因此，其1D等效结构的有效折射率分布只与半径大小有关。我们可以注意到，这种方法类似于平面光波导的EIM。唯一的区别在于，其有效折射率是沿着方向角和半径方向计算，而不是沿着笛卡儿坐标的正交方向计算的。与平面波导不同，MOF的EIM可以算是一种“向量”法。即，它用传统光纤近似MOF，从而可以通用完备的向量分析进行计算（参考3.3.3节）。MOF的这种EIM的“向量”特性，不应该看作是一种精度的保证。实际上，EIM是一种近似法，它只能用于定型分析。如果要进行定量分析，应该使用其他解析方法，以得到比近似求解波动方程更好的精度。

MOF分析中一种应用非常广泛的方法是分段函数法。它特别适合空心光纤的设计。与第一种EIM法类似，它将空心光纤的横截面分为两个区域：芯区和光子晶体包层区。磁场[195]或电场[196,197]的横向分量可以有厄密－高斯函数和余弦函数的和表示。厄密－高斯函数集可以有效的近似芯区的局部场，而余弦函数可以近似表示包层的场分布。为了简化重叠积分的运算，折射率分布也可以用厄密－高斯函数和余弦函数近似表示。这种方法的一个好处，是它会得到一个线性特征值问题，可以用标准数值方法求解。更多有关分段函数法及其扩展的介绍，可以参考Kundsen和Bjarklev[198]以及Zhi等人文献[199]。

一种应用广泛，可以处理更普通 MOF 结构的方法是多极法（MPM）[200]。MPM 将 MOF 的横截面分为若干恒定折射率区，例如，对图 3. 16d 的结构，则有 As_2Se_3 玻璃区和三个空气孔区。每一个区域的纵向电场和磁场分量可以用汉克尔和贝塞尔函数展开。然后在区域间的边界折射率变化处，引入正切场分量的连续性，从而可以得到一个非线性特征值问题。其系数矩阵是不足秩的，可以得到模态传播常数。MPM 最初只用于圆形子区域；不过，后来它发展可以处理非圆形子区域。与 MPM 相对关系较密的方法，是源 - 模态法（SMT）[201]。与 MPM 相似，它也将横截面分为若干个恒定折射率区。每个区域内电场和磁场的纵向场分量可以用汉克尔函数近似，它可得到每个区域内霍尔姆兹方程的基本解。

汉克尔函数以一系列适当分散的虚拟原点为中心，然后沿着场边界方向表示正切场分布。和 MPM 类似，考虑正切场分量连续性可得到一个非线性特征值问题。这个特征值问题可以解出传播常数。第三种方法与 MPM 和 SMT 关系紧密，它称为边界元法（BEM）[202]或更常见的积分方程式法（IEM）[203,204]。BEM 是一种将纯数值方法和解析法混合起来的方法。它用极高效率的求积公式计算线积分。所以，BEM 的计算效率要比 FEM 和 FDM 高很多，对比 FEM 和 FDM，BEM 的另一个优点，是它通过格林恒等式，将面积分转化为线积分，从而将 2D 问题简化为 1D 问题。但这一个优点，在无法直接找到非均匀介质基本解的时候，会变成缺陷。因此，BEM 需要将光纤的横截面分为若干恒定折射率区间（与 MPM 和 SMT 一样）。沿着边界区域的未知电磁场分量可以满足积分方程式。需要注意的是，BEM 特别适合处理两个区域边界为光滑曲线，即没有拐角的情况。考虑边界连续性条件以及先积分的数值表示后，BEM 可以得到一个非线性特征值问题，从而可以解出导引模的传播常数。这个过程涉及很多变量。BEM 与 MPM 和 SMT 最大的区别是，后两种方法可以避免汉克尔函数在原点的秩不足的处理，而 BEM 则长于通过适当的积分处理方程秩不足，以使其可积。MPM、SMT 和 BEM 最大的局限，在于它们都无法高效率的计算连续变化折射率分布，例如镧系离子掺杂的情况。对这种情况，可以使用 FEM 和 FDM。不仅如此，与 FEM 和 FDM 不同，这三种方法（MPM、SMT、BEM）都和解析法有关，它们都需要求解非线性特征值问题。这一过程都有些复杂，且需要对理论和问题求解方法有很深的理解[205]。可能这一个问题，是限制 MPM、SMT 和 BEM 应用的一个重要原因，使得很多用户倾向于选用 FDM 和 FEM 解法。

另一类解析法基于傅里叶展开，它在直角或柱坐标系下，对一个未知场用调和函数展开[207]。这一方法的一个弱点与吉伯斯现象有关，即，有限项傅里叶序列在表示函数不连续点时会出现跳变。这个问题，在最近，才通过应用快速傅里叶分解解决。基于现代傅里叶序列的方法可参考 Boyer 等人的文献[208,209]，它可与标准 MPM 相当。

参考文献

1. Sujecki, S., et al., Novel vectorial analysis of optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(7): p. 1329–1335.
2. Tamir, T., *Integrated Optics*. 1975, Berlin: Springer Verlag.
3. Ebeling, K.J., *Integrated Optoelectronics: Waveguide Optics, Photonics, Semiconductors*. 1993, Berlin: Springer Verlag.
4. Debnath, L. and Miskusinski, P., *Introduction to Hilbert Spaces with Applications*. 2005, London: Elsevier.
5. Kreyszig, E., *Introductory Functional Analysis*. 1978, London: Wiley.
6. Majewski, A. and S. Sujecki, Modes in rectangular fibres. *Optoelectronics Review*, 1996. 4(1/2): p. 45–50.
7. Marcatili, E.A.J., Dielectric rectangular waveguide an directional coupler for integrated optics. *Bell System Technical Journal*, 1969. 48(7): p. 2071–2102.
8. Goell, J.E., A circular harmonic computer analysis of rectangular dielectric waveguides. *Bell System Technical Journal*, 1969. 48(7): p. 2133–2160.
9. Majewski, A. and S. Sujecki, Analiza wlasciwosci propagacyjnych swiatlowodów prostokatnych (in Polish). *Prace Naukowe Politechniki Warszawskiej*, 1996. 110: p. 5–35.
10. Goell, J.E., Rib waveguide for integrated optical circuits. *Applied Optics*, 1973. 12(12): p. 2797–2798.
11. Soref, R.A., J. Schmidtchen, and K. Petermann, Large single mode rib waveguides in GeSi-Si and Si-on-SiO2. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(8): p. 1971–1974.
12. Marcatili, E.A.J., Slab coupled waveguides. *Bell System Technical Journal*, 1974. 53(4): p. 645–674.
13. Dagli, N. and C.G. Fonstad, Universal design curves for rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1988. 6(6): p. 1136–1145.
14. Pogossian, S.P., L. Vescan, and A. Vonsovici, The single mode condition for semiconductor rib waveguides with large cross section. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(10): p. 1851–1853.
15. Powell, O., Single mode condition for silicon rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(10): p. 1851–1855.
16. Lousteau, J., et al., The single mode condition for silicon on insulator optical rib waveguides with large cross section. *Journal of Lightwave Technology*, 2004. 22(8): p. 1923–1929.
17. Majewski, A. and S. Sujecki, Rib lightguides and couplers. *Bull. Polish Academy of Sciences: Technical Sciences*, 1997. 45: p. 145–150.
18. Majewski, A. and S. Sujecki, Polarisation charcteristics of optical rib waveguides. *Optica Applicata*, 1998. 28(4): p. 76–82.
19. Chiang, K.S. and W.P. Wong, Rib waveguides with degenerate polarised modes. *Electronics Letters*, 1996. 32(12): p. 1098–1099.
20. Petermann, K., Properties of optical rib-guides with large cross-section. *Archiv fuer Elektrische Uebertragung*, 1976. 30(3): p. 139–140.
21. Duguay, M.A., et al., Antiresonant reflecting optical waveguides in SiO2-Si multilayer structure. *Applied Physics Letters*, 1986. 49(7): p. 13–15.
22. Gerces, I., J. Subias, and R. Alonso, Analysis of the modal solutions of rib antiresonant reflecting optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(9): p. 1566–1574.
23. Zmudzinski, C., et al., Three-core ARROW type diode laser: Novel high power, novel high power, single mode device, and effective master oscillator for flared antiguided MOPAs. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1995. 2(2): p. 129–137.

24. MacFayden, D.N., C.R. Stanley, and C.D.W. Wilkinson, Waisted-rib optical waveguides in GaAs. *Electronics Letters*, 1980. 16(11): p. 440.
25. Petermann, K., *Laser Diode Modulation and Noise*. 1991, London: Kluwer Academic Publishers.
26. Qiu, B.C., et al., Monolitic fabrication of 2x2 crosspoint switches in InGaAs-InAlGaAs multiple quantum wells. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2001. 13(12): p. 1292–1294.
27. Polman, A., et al., European Patent 98830592.6, US Patent 09/415,022.
28. Liu, A., et al., A high-speed silicon optical modulator based on a metal-oxide-semiconductor capacitor. *Nature*, 2004. 427(6975): p. 615–618.
29. Rong, H., et al., An all-silicon Raman laser. *Nature*, 2005. 433(7023): p. 292–294.
30. Wooten, L., et al., A review of lithium niobate modulators for fiber optic communications systems. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2000. 6(1): p. 69–81.
31. Brinkman, R., et al., Erbium-doped single- and double-pass Ti:$LiNbO_3$ waveguide amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1994. 30(10): p. 2357–2360.
32. Suzuki, S., et al., High density integrated planar lightwave circuits using SiO2-GeO2 waveguides with high refractive index difference. *Journal of Lightwave Technology*, 1994. 12(5): p. 790–796.
33. Wang, W., et al., 40-GHz polymer electrooptic phase modulators. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1995. 7(6): p. 638–640.
34. Sloo, L.H., et al., Optical properties of lissamine functionalized Nd^{3+} complexes in polymer waveguides and solution. *Optical Materials*, 2000. 14(2): p. 101–107.
35. Hunsperger, R.G., *Integrated Optics*. 2002, Berlin: Springer Verlag.
36. Maerz, R., *Integrated Optics: Design and Modelling*. 1995, London: Artech House.
37. Petermann, K., et al., Integrated Optical Waveguides in Silicon. *Archiv fuer Elektrische Uebertragung (AEU)*, 1991. 45(5): p. 273–278.
38. Fishbeck, G., et al., Singlemode optical waveguides using a high temperature stable polymer with low losses in the 1.55 mm range. *Electronics Letters*, 1997. 33(518–519).
39. Yan, Y.C., et al., Erbium-doped phosphate glass waveguide on silicon with 4.1 dB/cm gain at 1.535 mm. *Applied Physics Letters*, 1997. 71(20): p. 2922–2924.
40. Marcuse, D., *Light Transmission Optics*. 1972, New York: van Nostrand Reinhold.
41. Marcuse, D., *Theory of Dielectric Optical Waveguides*. 1974, San Diego: Academic Press.
42. Rozzi, T. and M. Mongiardo, *Open Electromagnetic Waveguides*. 1997, London: IEE.
43. Anemogiannis, E. and E.N. Glytsis, Multilayer wave-guides - efficient numerical-analysis of general structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1992. 10(10): p. 1344–1351.
44. Majewski, A., Numerical analysis of the multistep-index fiber having the uniaxial anisotropy. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences, Technical Sciences*, 1984. 32(11–12): p. 709–714.
45. Ding, H. and K.T. Chan, Solving planar dielectric waveguide equations by counting the number of guided modes. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1997. 9(2): p. 215–217.
46. Anemogiannis, E., E.N. Glytsis, and T.K. Gaylord, Efficient solution of eigenvalue equations of optical wave-guiding structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1994. 12(12): p. 2080–2084.
47. Anemogiannis, E., E.N. Glytsis, and T.K. Gaylord, Determination of guided and leaky modes in lossless and lossy planar multilayer optical waveguides: Reflection pole method and wavevector density method. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(5): p. 929–941.
48. Sujecki, S., Arbitrary truncation order three-point finite difference method for optical waveguides with stepwise refractive index discontinuities. *Optics Letters*, 2010. 35(24): p. 4115–4117.
49. Smith, G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Method*. 1988, Oxford: Oxford University Press.

50. Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., and Flannery, B.P., *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. 2002, Cambridge: Cambridge University Press.
51. Vassallo, C., Improvement of finite difference methods for step-index optical waveguides. *IEE Proceeding J*, 1992. 139(2): p. 137–142.
52. Stern, M.S., Semivectorial polarised H field solutions for dielectric waveguides with arbitrary index profiles. *IEE Proceeding J*, 1988. 135(5): p. 333–338.
53. Chiou, Y.-P. and C.-H. Du, Arbitrary-order interface conditions for slab structures and their applications in waveguide analysis. *Optics Express*, 2010. 18(5): p. 4088–4102.
54. Sujecki, S., Accuracy of three-point finite difference approximations for optical waveguides with step-wise refractive index discontinuities. *Opto-Electronics Review*, 2011. 19(2): p. 145–150.
55. Snyder, A.W., Love, J.D., *Optical Waveguide Theory*. 1983, London: Chapman and Hall.
56. Lee, S.L., et al., On leaky mode-approximations for modal expansion in multilayer open wave-guides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1995. 31(10): p. 1790–1802.
57. Hu, J. and C.R. Menyuk, Understanding leaky modes: Slab waveguide revisited. *Advances in Optics and Photonics*, 2009. 1(1): p. 58–106.
58. Jablonski, T.F., Complex-modes in open lossless dielectric wave-guides. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 1994. 11(4): p. 1272–1282.
59. Yevick, D., et al., Stability issues in vector electric-field propagation. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1995. 7(6): p. 658–660.
60. Xie, H., W.T. Lu, and Y.Y. Lu, Complex modes and instability of full-vectorial beam propagation methods. *Optics Letters*, 2011. 36(13): p. 2474–2476.
61. Deng, H. and D. Yevick, The nonunitarity of finite-element beam propagation algorithms. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2005. 17(7): p. 1429–1431.
62. Ramaswamy, W., Strip-loaded film waveguides. *Bell System Technical Journal*, 1974. 53(4): p. 697–704.
63. Benson, T.M., R.J. Bozeat, and P.C. Kendall, Rigorous effective index method for semiconductor rib wave-guides. *IEE Proceedings-J Optoelectronics*, 1992. 139(1): p. 67–70.
64. Chiang, K.S., Effective-index method for the analysis of optical wave-guide couplers and arrays - an asymptotic theory. *Journal of Lightwave Technology*, 1991. 9(1): p. 62–72.
65. Chiang, K.S., Analysis of rectangular dielectric wave-guides - effective-index method with built-in perturbation. *Electronics Letters*, 1992. 28(4): p. 388–390.
66. Chiang, K.S., K.M. Lo, and K.S. Kwok, Effective-index method with built-in perturbation correction for integrated optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(2): p. 223–228.
67. Robertson, M.J., et al., The weighted index method - a new technique for analyzing planar optical-waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1989. 7(12): p. 2105–2111.
68. Vassallo, C. and Y.H. Wang, A new semirigorous analysis of rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1990. 8(1): p. 56–65.
69. McIlroy, P.W.A., M.S. Stern, and P.C. Kendall, Spectral index method for polarized modes in semiconductor rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1990. 8(1): p. 113–117.
70. Robson, P.N. and P.C. Kendall, *Rib Waveguide Theory by the Spectral Index Method*. 1990, London: Research Studies Press.
71. Sudbo, A.S., Numerically stable formulation of the transverse resonance method for vector mode-field calculations in dielectric waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1993. 5(3): p. 342–344.
72. Peng, S.T. and A.A. Oliner, Guidance and leakage properties of a class of open dielectric waveguides: Part I—mathematical formulation. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1981. 29(9): p. 843–855.

73. Sudbo, A.S., Film mode matching: a versatile numerical method for vector mode field calculations in dielectric waveguides. *Pure and Applied Optics*, 1993. 2(3): p. 211–233.
74. Rozzi, T., et al., Variational analysis of the dielectric rib waveguide using the concept of 'transition function' and including edge singularities. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1991. 39(2): p. 247–257.
75. Dagli, N. and C.G. Fonstad, Analysis of rib dielectric waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1985. 21(4): p. 315–321.
76. Koshiba, M. and M. Suzuki, Vectorial wave analysis of dielectric waveguides for optical-integrated circuits using equivalent network approach. *Journal of Lightwave Technology*, 1986. 4(6): p. 656–664.
77. Payne, F.P., A new theory of rectangular optical waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 1982. 14(6): p. 525–537.
78. Berry, G.M., et al., Analysis of multilayered dielectric waveguides: Variational treatment. *Electronics Letters*, 1994. 30(24): p. 2029–2030.
79. M. Reed, et al., Free space radiation mode analysis of rectangular dielectric waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 1996. 28(9): p. 1175–1179.
80. McIlroy, P.W.A., M.S. Stern, and P.C. Kendall, Spectral index method for polarised modes in semiconductor rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1990. 8(1): p. 113–117.
81. Smartt, C.J., T.M. Benson, and P.C. Kendall, Exact transcendental equation for scalar modes of rectangular dielectric waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 1994. 26(6): p. 641–644.
82. Kendal, P.C., M.S. Stern, and P.N. Robson, Analysis of discrete spectral index method for rib waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 1990. 22(6): p. 555–560.
83. Vassallo, C. and Y.H. Wang, A new semirigorous analysis of rib waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1990. 9(1): p. 56–65.
84. Cullen, A.L., O. Ozkan, and L.A. Jackson, Point-matching technique for rectangular-cross-section dielectric rod. *Electronics Letters*, 1971. 7(17): p. 497–499.
85. Bienstman, P., Two-stage mode finder for waveguides with a 2D cross-section. *Optical and Quantum Electronics*, 2004. 36(1–3): p. 5–14.
86. Henry, C.H. and B.H. Verbeek, Solution of the scalar wave equation for arbitrarily shaped dielectric waveguides by two-dimensional Fourier analysis. *Journal of Lightwave Technology*, 1989. 7(2): p. 308–313.
87. Hewlett, S.J. and F. Ladouceur, Fourier decomposition method applied to mapped infinite domains: scalar analysis of dielectric waveguides down to modal cutoff. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(3): p. 375–383.
88. Smartt, C.J., T.M. Benson, and P.C. Kendall. Exact operator method for the analysis of dielectric waveguides with application to integrated optics devices and laser facets. In *IEE Second International Conference on Computation in Electromagnetics*. 1995.
89. Berry, G.M., et al., Exact and variational Fourier-transform methods for analysis of multilayered planar wave-guides. *Iee Proceedings-Optoelectronics*, 1995. 142(1): p. 66–75.
90. Smartt, C.J., et al., Exact polarised rib waveguide analysis. *Electronics Letters*, 1994. 30(7): p. 1127–1128.
91. Hugonin, J.P., et al., Fourier modal methods for modeling optical dielectric waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 2005. 37(1–3): p. 107–119.
92. Kim, C.M. and R.V. Ramaswamy, Modelling of graded-index channel waveguides using nonuniform finite difference method. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, 1989. 7(19): p. 1581–1589.
93. Schultz, N., et al., Finite difference method without spurious solutions for the hybrid-mode analysis of diffused channel waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1990. 38(6): p. 722–729.

94. Seki, S., T. Yamanaka, and K. Yokoyama, Two-dimensional analysis of optical waveguides with non-uniform finite difference method. *IEE Proceeding J*, 1991. 138(2): p. 123–127.
95. Nehrbass, J.W. and R. Lee, Optimal finite-difference sub-gridding techniques applied to the Helmholtz equation. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 2000. 48(6): p. 976–984.
96. Chiou, Y.P., Y.C. Chiang, and H.C. Chang, Improved three-point formulas considering the interface conditions in the finite-difference analysis of step-index optical devices. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(2): p. 243–251.
97. Liu, P.-L. and B.J. Li, Full-vectorial mode analysis of rib waveguides by iterative Lanczos reduction. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1993. 29(12): p. 2859–2863.
98. Wijnands, F., et al., Efficient semivectorial mode solvers. *Ieee Journal of Quantum Electronics*, 1997. 33(3): p. 367–374.
99. Ramm, K., P. Lusse, and H.G. Unger, Multigrid eigenvalue solver for mode calculation of planar optical waveguides. *Ieee Photonics Technology Letters*, 1997. 9(7): p. 967–969.
100. Matin, M.A., et al., New technique for finite difference analysis of optical waveguide problems. *International Journal of Numerical Modelling*, 1994. 7(1): p. 25–33.
101. Benson, T.M., et al., Highly accurate vector correction for optical waveguide propagation constants. *IEE Proceedings-J*, 1993. 140(2): p. 93–97.
102. Xu, C.L., et al., Full-vectorial mode calculations by finite difference method. *IEE Proceeding J*, 1994. 141(5): p. 281–286.
103. Stern, M.S., Semivectorial polarised finite difference method for optical dielectric waveguides with arbitrary index profiles. *IEE Proceeding J*, 1988. 135(1): p. 56–63.
104. Gallick, A.T., T. Kerkhoven, and U. Ravaioli, Iterative solution of the eigenvalue problem for a dielectirc waveguide. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1992. 40(2): p. 699–705.
105. Hadley, G.R., Low truncation error finite difference equations for photonics simulation I: beam propagation. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(1): p. 134–141.
106. Hadley, G.R., Low truncation error finite difference equations for photonics simulation II: vertical cavity surface emitting lasers. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(1): p. 142–151.
107. Hadley, G.R., High accuracy finite difference equations for dielectric waveguide analysis I: uniform regions and dielectric interfaces. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(7): p. 1210–1218.
108. Hadley, G.R., High accuracy finite difference equations for dielectric waveguide analysis II: dielectric corners. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(7): p. 1219–1231.
109. Luesse, P., et al., Analysis of vectorial mode fields in optical waveguides by a new finite difference method. *Journal of Lightwave Technology*, 1994. 12(3): p. 487–494.
110. Decoctignie, J.D., O. Parriaux, and F. Gardiol, Birefringence properties of twin-core fibres by finite differences. *Journal of Optical Communications and Networking*, 1982. 3(1): p. 8–12.
111. Chiang, Y.C., Y.P. Chiou, and H.C. Chang, Improved full-vectorial finite-difference mode solver for optical waveguides with step-index profiles. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(8): p. 1609–1618.
112. Chiou, Y.-P. and C.-H. Du, Arbitrary-Order Full-Vectorial Interface Conditions and Higher Order Finite-Difference Analysis of Optical Waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2011. 29(22): p. 3445–3452.
113. Xia, J. and J. Yu, New finite-difference scheme for simulations of step-index waveguides with tilt interfaces. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2003. 15(9): p. 1237–1239.
114. Ando, T., et al., Eigenmode analysis of optical waveguides by a Yee-mesh-based imaginary-distance propagation method for an arbitrary dielectric interface. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(8): p. 1627–1634.

115. Chiou, Y.-P., et al., Finite-Difference Modeling of Dielectric Waveguides With Corners and Slanted Facets. *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(12): p. 2077–2086.
116. Benson, T.M., R.J. Bozeat, and P.C. Kendall, Complex finite difference method applied to the analysis of semiconductor lasers. *IEE Proceeding J*, 1994. 141(2): p. 97–101.
117. Schweig, E. and W.B. Bridges, Computer-analysis of dielectric waveguides - a finite-difference method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1984. 32(5): p. 531–541.
118. Patrick, S.S. and K.J. Webb, A variational finite difference analysis for dielectric waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques,* 1992. 40(4): p. 692–698.
119. Lagu, R.K. and R.V. Ramaswamy, A variational finite-difference method for analysing channel waveguides with arbitrary index profiles. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1986. 22(6): p. 968–976.
120. Schultz, U. and R. Pregla, A new technique for the analysis of the dispersion characteristics of planar waveguides. *Archiv fuer Elektrische Uebertragung*, 1980. 34(4): p. 169–173.
121. Diestel, H., A method for calculating the guided modes of strip-loaded optical waveguides with arbitrary index profile. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1984. 20(11): p. 1288–1293.
122. Hoekstra, H.J.W.M., An economic method for the solution of the scalar wave equation for arbitrary shaped optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1990. 8(5): p. 789–793.
123. Pregla, R., *Analysis of Electromagnetic Fields and Waves: The Method of Lines*. 2008, Chichester: Wiley.
124. Obaya, S.S.A., B.M.A. Rahman, and H.A. El-Mikati, New full vectorial numerically efficient propagation algorithm based on the finite element method. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(3): p. 409–415.
125. Mabay, N., P.E. Lagasse, and P. Vandenblucke, Finite element analysis of optical waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1981. 29(6): p. 600–605.
126. Lee, J.F., D.K. Sun, and Z.J. Cendes, Full wave analysis of dielectric waveguides using tangential vector finite elements. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1991. 39(8): p. 1262–1271.
127. Koshiba, M. and K. Inoue, Simple and efficient finite element analysis of microwave and optical waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1992. 40(2): p. 371–377.
128. Hayata, K., et al., Vectorial finite element method without any spurious solutions for dielectric waveguideing problems using transverse magnetic field components. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1986. 34(11): p. 1120–1123.
129. Koshiba, M., K. Hayata, and M. Suzuki, Improved finite element formulation in terms of the magnetic field vector for dielectric waveguides. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1985. 33(3): p. 227–233.
130. Silveira, M. and A. Gophinat, Analysis of dielectric guides by transverse magnetic finite element penalty method. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(3): p. 442–446.
131. Fernandez, F.A., et al., Sparse matrix eigenvalue solver for finite element solution of dielectric waveguides. *Electronics Letters*, 1991. 27(20): p. 1824–1826.
132. Saad, Y., Numerical methods for large eigenvalue problems. 2011, SIAM: http://www-users.cs.umn.edu/~saad/eig_book_2ndEd.pdf.
133. Li, D.U. and H.C. Chung, An efficient full vectorial finite element modal analysis of dielectric waveguides incorporating inhomogenous elements across dielectric discontinuities. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2000. 36(11): p. 1251–1261.

134. Themistos, C., B.M.A. Rahman, and K.T.V. Grattan, Finite element analysis for lossy optical waveguides using perturbation techniques. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1994. 6(4): p. 537–539.
135. Koshiba, M., K. Hayata, and M. Suzuki, Approximate scalar finite element analysis of anisotropic optical waveguides with off-diagonal elements in permittivity tensor. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1984. 32(6): p. 587–593.
136. Wang, X.H., *Finite Element Methods for Nonlinear Optical Waveguides*. 1995, Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers.
137. Fernandez, F.A. and Y. Lu, *Microwave and Optical Waveguide Analysis by the Finite Element Method*. 1996, New York: John Wiley & Sons Inc.
138. Koshiba, M., *Optical Waveguide Analysis*. 1990, New York: McGraw-Hill, Inc.
139. Rahman, B.M.A. and A. Agrawal, *Finite Element Modeling Methods for Photonics*. 2013, Norwood: Artech House.
140. Lu, T. and D. Yevick, A vectorial boundary element method analysis of integrated optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(8): p. 1793–1807.
141. Lu, T. and D. Yevick, Comparative evaluation of a novel series approximation for electromagnetic fields at dielectric corners with boundary element method applications. *Journal of Lightwave Technology*, 2004. 22(5): p. 1426–1432.
142. Lu, W. and Y.Y. Lu, Waveguide mode solver based on Neumann-to-Dirichlet operators and boundary integral equations. *Journal of Computational Physics*, 2012. 231(4): p. 1360–1371.
143. Yu, B., J. Wang, and X. Sun, A Bi-boundary FEM-BEM approach for open structure optical waveguide problems. *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(14): p. 2765–2770.
144. Boriskina, S.V., et al., Highly efficient full-vectorial integral equation solution for the bound, leaky, and complex modes of dielectric waveguides. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2002. 8(6): p. 1225–1232.
145. Sudbo, A.S., Why are accurate computations of mode fields in rectangular dielectric wave-guides difficult. *Journal of Lightwave Technology*, 1992. 10(4): p. 418–419.
146. Hadley, G.R., High-accuracy finite-difference equations for dielectric waveguide analysis II: Dielectric corners. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(7): p. 1219–1231.
147. Thomas, N., P. Sewell, and T.M. Benson, A new full-vectorial higher order finite-difference scheme for the modal-analysis of rectangular dielectric waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2007. 25(9): p. 2563–2570.
148. Lui, W.W., et al., Full vectorial mode analysis with considerations of field singularities at corners of optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(8): p. 1509–1513.
149. Vassallo, C., Mode solvers 1993–1995 optical mode solvers. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29(2): p. 95–114.
150. Hondros, D. and P. Debye, Electromagnetic waves in dielectrical wires. *Annalen Der Physik*, 1910. 32(8): p. 465–476.
151. Okoshi, T., *Optical Fibres*. 1982, London: Academic Press.
152. Majewski, A., *Theory and Design of optical fibres (in Polish)*. 1991, Warsaw: Wydawnictwo Naukowo-Techniczne.
153. Okamoto, K., *Fundamentals of Optical Waveguides*. 2006, London: Elsevier.
154. Black, R.J. and Gagnon, L., *Optical Waveguide Modes: Polarization, Coupling and Symmetry*. 2010, London: McGraw-Hill.
155. Yeh, C., Elliptical dielectric waveguides. *Journal of Applied Physics*, 1962. 33(11): p. 3235.
156. Dyott, R.B., *Elliptical Fiber Waveguides*. 1996, Boston: Artech House.
157. Majewski, A. and H.G. Unger, Single-mode w-fibers with profile-threshold for low dispersion over a wide spectral range. *Aeu-Archiv Fur Elektronik Und Ubertragungstechnik-International Journal of Electronics and Communications*, 1983. 37(9–10): p. 336–338.

158. Temelkuran, B., et al., Wavelength-scalable hollow optical fibres with large photonic bandgaps for CO(2) laser transmission. *Nature*, 2002. 420(6916): p. 650–653.
159. Ibanescu, M., et al., An all-dielectric coaxial waveguide. *Science*, 2000. 289(5478): p. 415–419.
160. Noda, J., K. Okamoto, and Y. Sasaki, Polarization-maintaining fibers and their applications. *Journal of Lightwave Technology*, 1986. 4(8): p. 1071–1089.
161. Birks, T.A., J.C. Knight, and P.S. Russell, Endlessly single-mode photonic crystal fiber. *Optics Letters*, 1997. 22(13): p. 961–963.
162. Bjarklev, A., Bjarklev, A., and Broeng, J., *Photonic Crystal Fibres*. 2003, London: Kluwer Academic Publishers.
163. Poli, F., Cucinotta, A., and Selleri, S., *Photonic Crystal Fibres*. 2007: Springer.
164. Zolla, F., Reneversez, G., Nicolet, A., Kuhlmev, B., Guenneau, S., Felbacq, D., *Foundations of Photonic Crystal Fibres*. 2005, London: Imperial College Press.
165. Lin, A., et al., Solid-core tellurite glass fiber for infrared and nonlinear applications. *Optics Express*, 2009. 17(19): p. 16716–16721.
166. L. Sojka, Z.T., N.C. Neate, D. Furniss, S. Sujecki, T.M. Benson, and A.B. Seddon, Broadband, mid-ifrared emission from r3+ doped GeAsGaSe chalcogenide fiber, optically clad. *Optics Material*, 2014. 36(6): p. 1076–1082.
167. Shalem, S., et al., Silver halide single-mode fibers for the middle infrared. *Applied Physics Letters*, 2005. 87(9).
168. Ishigure, T., et al., Formation of the refractive index profile in the graded index polymer optical fiber for gigabit data transmission. *Journal of Lightwave Technology*, 1997. 15(11): p. 2095–2100.
169. Richardson, K., Krol, D., and Hirao, K., Glasses for photonic applications. *International Journal of Applied Glass Science*, 2010. 1(1): p. 74–86.
170. Harrington, J.A., *Infrared Fibres and Their Applications*. 2004, Bellingham: SPIE.
171. El-Amraoui, M., et al., Strong infrared spectral broadening in low-loss As-S chalcogenide suspended core microstructured optical fibers. *Optics Express*, 2010. 18(5): p. 4547–4556.
172. Lian, Z.G., et al., Solid Microstructured Chalcogenide Glass Optical Fibres for the Near- and Mid-Infrared Spectral Regions. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2009. 21(24): p. 1804–1806.
173. Limpert, J., et al., Extended single-mode photonic crystal fiber lasers. *Optics Express*, 2006. 14(7): p. 2715–2720.
174. Du, C.-H. and Y.-P. Chiou, Higher-Order Full-Vectorial Finite-Difference Analysis of Waveguiding Structures With Circular Symmetry. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2012. 24(11): p. 894–896.
175. Lu, Y.-C., et al., Improved full-vector finite-difference complex mode solver for optical waveguides of circular symmetry. *Journal of Lightwave Technology*, 2008. 26(13–16): p. 1868–1876.
176. Yariv, A., Optical electronics in modern communications. 1997, New York: Oxford University Press.
177. Abramowitz, A. and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 1970, New York: Dover Publications.
178. Gloge, D., Weakly guiding fibers. *Applied Optics*, 1971. 10(10): p. 2252–2258.
179. Riishede, J., N.A. Mortensen, and J. Laegsgaard, A 'poor man's approach' to modelling micro-structured optical fibres. *Journal of Optics a-Pure and Applied Optics*, 2003. 5(5): p. 534–538.
180. Pozirikidis, C., *Numerical Computation in Science and Engineering*. 1998, Oxford: Oxford University Press.
181. Torres, P., V.H. Aristizabal, and M.V. Andres, Modeling of photonic crystal fibers from the scalar wave equation with a purely transverse linearly polarized vector potential. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2011. 28(4): p. 787–791.

182. Obayya, S.S.A., B.M.A. Rahman, and K.T.V. Grattan, Accurate finite element modal solution of photonic crystal fibres. *Iee Proceedings-Optoelectronics*, 2005. 152(5): p. 241–246.
183. Koshiba, M., Full-vector analysis of photonic crystal fibers using the finite element method. *Ieice Transactions on Electronics*, 2002. E85C(4): p. 881–888.
184. Saitoh, K. and M. Koshiba, Numerical modeling of photonic crystal fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2005. 23(11): p. 3580–3590.
185. De Francisco, C.A., B.V. Borges, and M.A. Romero, A semivectorial method for the modeling of photonic crystal fibers. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2003. 38(5): p. 418–421.
186. Fogli, F., et al., Full vectorial BPM modeling of index-guiding photonic crystal fibers and couplers. *Optics Express*, 2002. 10(1): p. 54–59.
187. Zhu, Z.M. and T.G. Brown, Full-vectorial finite-difference analysis of microstructured optical fibers. *Optics Express*, 2002. 10(17): p. 853–864.
188. Chiou, Y.P. and C.H. Du, Arbitrary-order full-vectorial interface conditions and higher order finite-difference analysis of optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2011. 29(22): p. 3445–3452.
189. Saitoh, K. and M. Koshiba, Full-vectorial imaginary-distance beam propagation method based on a finite element scheme: Application to photonic crystal fibers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2002. 38(7): p. 927–933.
190. Dangui, V., M.J.F. Digonnet, and G.S. Kino, A fast and accurate numerical tool to model the modal properties of photonic-bandgap fibers. *Optics Express*, 2006. 14(7): p. 2979–2993.
191. Mortensen, N.A., et al., Modal cutoff and the V parameter in photonic crystal fibres. *Optics Letters*, 2003. 28(20): p. 1879–1881.
192. Koshiba, M. and K. Saitoh, Applicability of classical optical fiber theories to holey fibers. *Optics Letters*, 2004. 29(15): p. 1739–1741.
193. Li, Y.F., C.Y. Wang, and M.L. Hu, A fully vectorial effective index method for photonic crystal fibers: Application to dispersion calculation. *Optics Communications*, 2004. 238(1–3): p. 29–33.
194. Rastogi, V. and K.S. Chiang, Holey optical fiber with circularly distributed holes analyzed by radial effective-index method. *Optics Letters*, 2003. 28(24): p. 2449–2451.
195. Mogilevtsev, D., T.A. Birks, and P.S. Russell, Localized function method for modeling defect modes in 2-D photonic crystals. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(11): p. 2078–2081.
196. Monro, T.M., et al., Holey optical fibres: an efficient modal model. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(6): p. 1093–1102.
197. Monro, T.M., et al., Modelling large air fraction holey optical fibres. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(1): p. 50–56.
198. Knudsen, E. and A. Bjarklev, Modelling photonic crystal fibres with Hermite-Gaussian functions. *Optics Communications*, 2003. 222(1–6): p. 155–160.
199. Zhi, W., G.B. Ren, and S.Q. Lou, A novel supercell overlapping method for different photonic crystal fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2004. 22(3): p. 903–916.
200. White, T.P., et al., Multipole method for microstructured optical fibers. I. Formulation. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2002. 19(10): p. 2322–2330.
201. Hochman, A. and Y. Leviatan, Analysis of strictly bound modes in photonic crystal fibers by use of a source-model technique. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2004. 21(6): p. 1073–1081.
202. Guan, N., et al., Boundary element method for analysis of holey optical fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(8): p. 1787–1792.
203. Sotsky, A.B. and L.I. Sotskaya, Method of integral equations in the theory of microstructured optical fibers. *Technical Physics*, 2004. 49(2): p. 174–182.

204. Cheng, H., et al., Fast, accurate integral equation methods for the analysis of photonic crystal fibers - I: Theory. *Optics Express*, 2004. 12(16): p. 3791–3805.
205. Hochman, A. and Y. Leviatan, Efficient and spurious-free integral-equation-based optical waveguide mode solver. *Optics Express*, 2007. 15(22): p. 14431–14453.
206. Szpulak, M., et al., Comparison of different methods for rigorous modeling of photonic crystal fibers. *Optics Express*, 2006. 14(12): p. 5699–5714.
207. Issa, N.A. and L. Poladian, Vector wave expansion method for leaky modes of microstructured optical fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(4): p. 1005–1012.
208. Boyer, P., et al., A new differential method applied to the study of arbitrary cross section microstructured optical fibers. *Optical and Quantum Electronics*, 2006. 38(1–3): p. 217–230.
209. Boyer, P., et al., Improved differential method for microstructured optical fibres. *Journal of Optics a-Pure and Applied Optics*, 2007. 9(7): p. 728–740.

第4章　光束传播法

光波导导引光子器件发出的光。光波导在激光器二极管、定向耦合器、光纤激光器、放大器等等均有应用[1-3]。研究在光子器件导引结构中的光的传播，依靠第3章讨论的数值方法是不够的。这是因为，光子器件中的导引结构既不是完全笔直的，也不是无限长的。例如，对边发射激光器二极管，其长度一般为几百微米，而光纤激光器的光波导长度可以达到几米。不仅如此，沿着光波导传播的光束会遇到在空气－介质交界中断的情况。例如，在激光器二极管中负责对受激辐射光进行反馈的解理半导体反射镜的情况。

通常，在电介质中，麦克斯韦方程可以通过有限差分法，或有限元法得到数值解[4]。这些方法在所求域内计算场分布，受到源的分布和边界条件的影响。但是，当考虑光子器件中的光波导结构时，这些方法的计算效率变低。这是因为光波导结构尺寸和所导引光的波长相比非常大。因此，描述计算域内所有场采样点的矩阵会变得很大，以保证足够的精度。例如，对一个1000个波长长度（一个高功率边发射激光器二极管的长度）的波导，每个波长采样20次，分析一次就会得到200 000个采样点。不仅如此，和工作波长相比，光波导有较大的横向尺寸，同时在横截面上还有纳米尺度的特征。例如，工作波长在1μm附近的宽发光面激光器的光波导有200μm宽，同时其量子阱为10μm薄。因此，最近三十年，出现了很多专门为研究光子器件内光波导中光传播的数值算法。在它们中间，光束传播法（Beam Propagation Method，BPM）应用最为广泛。与直接求解麦克斯韦方程的办法不同，BPM计算受入射光束形状影响的射出光束性质（如图4.1所示），所以不需要描述中间的场采样点。

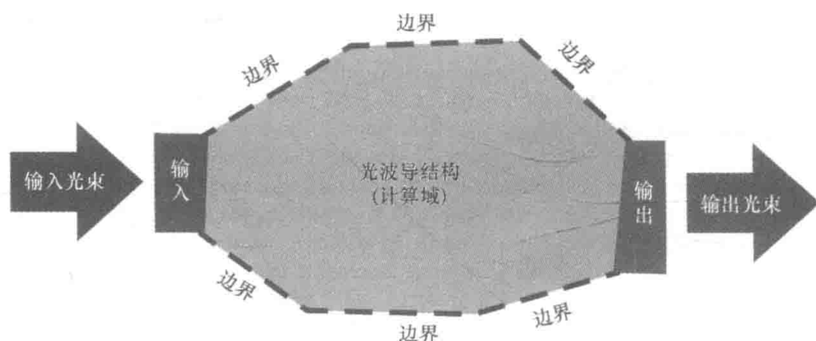


图4.1　平面光波导结构的示意

支撑 BPM 的假设是，在器件中，光场传播的主方向已知。主方向定义为光功率主要输出方向，而与这个方向相垂直的方向上光功率足够小，可忽略不计（如图4.2所示）。选择主方向后，场可以分解为沿着所选方向向后和向前行波。这种方法可以用于大量光子器件，所以 BPM 法在光子学设计工具中占有重要作用。

BPM 的理论将贯穿于本章中。近似体系和方法可以处理平方根和指数算子，适用于多种波导结构。在4.1节，我们将介绍 BPM 的理论。在4.2节，我们将讨论单方向 BPM 算法。在4.3节，我们将讨论双方项 BPM 算法。4.4节将讨论 BPM 数值实现的一些性质。4.5节将应用 BPM 研究给定波导结构中的光传播。为了完整起见，在4.6节，我们将对时域 BPM 和行波近似进行一个简短的讨论。

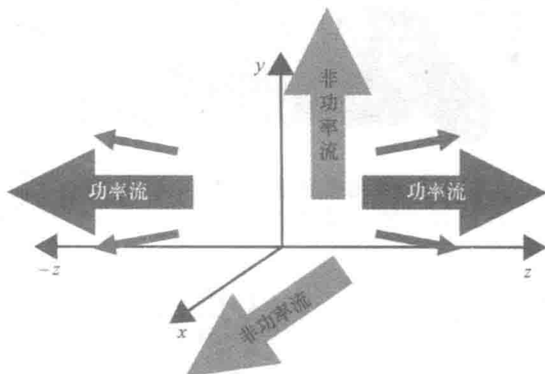


图4.2　器件模型中对功率流做方向分解

4.1　引言

在本节中，我们将展示光场如何分解为向前和向后传播波，同时，我们将推导构成 BPM 算法基础的方程。

在下面的推导中，我们假设 z 轴（如图4.3所示）方向为大部分功率传播的主方向。而横向的功率流可以忽略不计。在直角坐标系中（见图4.3），可由式（3.5a）得到如下三个方程组：

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_x)}{\partial x}\right)+\omega^2\mu_0\varepsilon E_x+\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_y)}{\partial y}\right)-\frac{\partial^2 E_y}{\partial x\partial y}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}E_z\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right)=0 \tag{4.1a}$$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_y)}{\partial y}\right)+\omega^2\mu_0\varepsilon E_y+\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\ \frac{\partial(\varepsilon E_x)}{\partial x}\right)-\frac{\partial^2 E_x}{\partial y\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}E_z\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right)=0 \tag{4.1b}$$

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2}+\omega^2\mu_0\varepsilon E_z+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial(\varepsilon E_z)}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\varepsilon}E_x\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\varepsilon}E_y\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right)=0 \tag{4.1c}$$

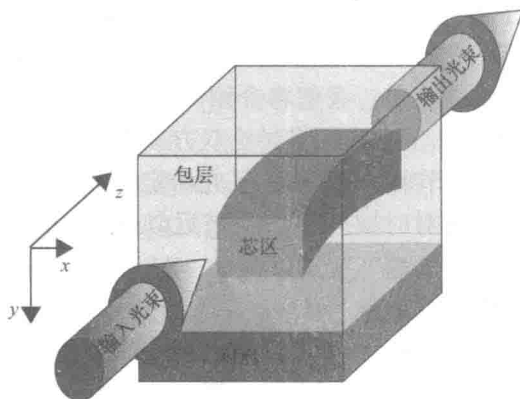


图 4.3 直角坐标系内的纵向缓变结构

同样，由式（3.5b）可得：

$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial x^2}\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_x}{\partial y}\right)+\omega^2\mu_0\varepsilon H_x+\varepsilon\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_x}{\partial z}\right)+\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\frac{\partial H_y}{\partial x}+\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\frac{\partial H_z}{\partial x}\right)=0 \tag{4.2a}$$

$$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial x}\right)+\frac{\partial^2 H_y}{\partial y^2}+\omega^2\mu_0\varepsilon H_y+\varepsilon\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_y}{\partial z}\right)+\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\frac{\partial H_x}{\partial y}+\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\frac{\partial H_z}{\partial y}\right)=0 \tag{4.2b}$$

$$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_z}{\partial x}\right)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial H_z}{\partial y}\right)+\omega^2\mu_0\varepsilon H_z+\frac{\partial^2 H_z}{\partial z^2}+\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}\frac{\partial H_x}{\partial z}+\frac{\partial\varepsilon}{\partial y}\frac{\partial H_y}{\partial z}\right)=0 \tag{4.2c}$$

光波导结构一般在光传播方向变化缓慢。因此，我们假设沿着 z 方向的介电常数 ε 的变化缓慢，即 $(\partial\varepsilon/\partial z)\approx 0$[5]。依照这个假设，电磁场的横向分量可以和纵向分量中单独分离出来，所以对横向场分量，方程（4.1）可以近似表示为如下方程：

$$\frac{\partial \vec{E}_t}{\partial z^2}=-(A+\omega^2\mu_0\varepsilon)\vec{E}_t \tag{4.3a}$$

而方程（4.2）可近似为

$$\frac{\partial \vec{H}_t}{\partial z^2}=-(B+\omega^2\mu_0\varepsilon)\vec{H}_t \tag{4.3b}$$

其中 $\vec{E}_t=\vec{i}_x E_x+\vec{i}_y E_y$，以及 $\vec{H}_t=\vec{i}_x H_x+\vec{i}_y H_y$。矩阵 A 和 B 的定义如式（3.13）。

方程（4.3）用于推导大部分的 BPM 算法。只有当横向分量和纵向分量无法

分离的时候才无法使用此式[6-8]。与第 3 章类似，方程（4.3）可以对支持极化模的波导结构做进一步化简。与光波导建模类似，对 x 极化模，方程（4.3）可化简为

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = -(a_{11} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) E_x \tag{4.4a}$$

和

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} = -(b_{22} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) H_y \tag{4.4b}$$

对 y 极化模，可化简为

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} = -(a_{22} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) E_y \tag{4.4c}$$

$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial z^2} = -(b_{11} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) H_x \tag{4.4d}$$

算子 a_{ji} 和 b_{ji} 参见表 3.1 和表 3.2。

与光波导类似，如果 ε 在横向坐标上缓变，则可以用标量近似：

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -(s + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) \Phi \tag{4.5}$$

式中，Φ 为标量位势，s 定义同式（3.16）。

此外，对在 y 方向无限长平板光波导结构（见图 2.2），可忽略方程（4.4）中对 y 的微分，得到如下方程：

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = -(a_{TE} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) E_x \tag{4.6a}$$

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} = -(b_{TE} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) H_y \tag{4.6b}$$

对 TE 模和 TM 模，有

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} = -(a_{TM} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) E_y \tag{4.6c}$$

$$\frac{\partial^2 H_x}{\partial z^2} = -(b_{TM} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) H_x \tag{4.6d}$$

算子 a_{TE}、a_{TM}、b_{TE} 和 b_{TM} 参见表 3.5。

如果 ε 为横向坐标方向缓变，可以再一次用标量近似：

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -(s_{1D} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon) \Phi \tag{4.7}$$

式中，Φ 为标量位势，以及

$$s_{1D} = \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

在“有效折射率法（3.2.4 节）”中讲解的有效折射率法，可以用于三维（3D）结

构的二维（2D）近似。

可以看到，从方程（4.3）~方程（4.7）有相同的形式，即

$$\frac{\partial^2 F}{\partial z^2} = -(L+\omega^2\mu_0\varepsilon)F \tag{4.8}$$

原则上，方程（4.8）可以通过有限元和有限差分法求解。但在很多实际应用中，这些算法的效率不高。一种提高效率的办法将 F 分解为向前和向后传播波。通常可以通过因式分解式（4.8）进行：

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - \mathrm{j}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon}\right)\left(\frac{\partial}{\partial z} + \mathrm{j}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon}\right)F = 0$$

如果只考虑方程（4.9）左侧其中任意一个算子与 F 相乘等于零，则可得到“单向波动方程”：

$$\frac{\partial F}{\partial z} = -\mathrm{j}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon}F \tag{4.9}$$

“单向波动方程”中一个算子与 F 相乘等于零对应了，波只沿着 z 轴一个方向传播。应用方程（4.9）的这一性质，可以构成消灭算子边界条件，以吸收数值仿真光和 RF 器件中的散射光[9]。

在介绍缓变（z）波包函数 Φ 之后，定义 $F=\Phi(x,y,z)*\exp(-\mathrm{j}\beta_r z)$，其中 β_r 为合适的参考传播函数，方程（4.9）变换为

$$\frac{\partial\Phi}{\partial z} = \mathrm{j}\beta_r\left(-\sqrt{1+\frac{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}{\beta_r^2}}+1\right)\Phi \tag{4.10}$$

方程（4.10）的解可以表示为如下形式：

$$\Phi(z_0+\Delta z) = \exp\int_{z=z_0}^{z=z_0+\Delta z}\left[\mathrm{j}\beta_r\left(-\sqrt{1+\frac{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}{\beta_r^2}}+1\right)\right]\Phi(z_0)\,\mathrm{d}z \tag{4.11}$$

如果介质可分为与 z 无关的折射率分布和区域浓度，并用每个区域的直角数值积分法则，可以将方程（4.11）化简为

$$\Phi(z_0+\Delta z) = \exp\left[\mathrm{j}\beta_r\left(-\sqrt{1+\frac{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}{\beta_r^2}}+1\right)\right]\Delta z\Phi(z_0) \tag{4.12}$$

方程（4.12）实现了一个已知前一个位置 z_0 的场分布，计算当前位置 $z_0+\Delta z$ 的场分布值的算法。应用方程（4.12）的主要问题，是需要找到算子 L，以及指数和平方根算子的合适的近似，从而在已知 $\Phi(z_0)$的情况下可以有效地计算 $\Phi(z_0+\Delta z)$。

图 4.4 总结了构成高效 BPM 算法的主要近似方法。处理指数算子有三种主要的方法：分步法，特征值展开法，和矩阵展开法。对平方根算子，BPM 算法可以分为两类：同轴算法和大角度算法。最后，有四种算法可以近似算子 L：有限差分法（FDM）、有限元法（FEM），模匹配法（MMM），和傅里叶极数法（FSM）。我们将在下一节更详细的讨论这些方法。

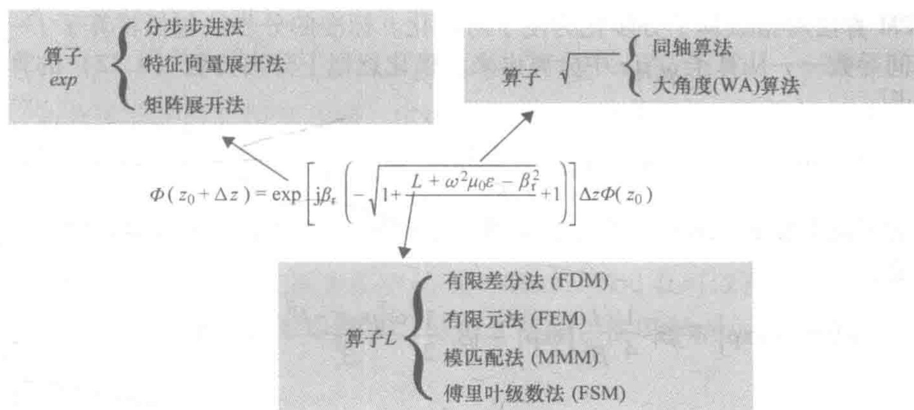


图 4.4　应用 BPM 算法的主要近似方法一览

需要注意的是，方程 (4.12) 同样体现了 BPM 算法根据哪种近似表示算子 L 的优先级，这些近似即向量法、极化法，标量法等等。为了避免混淆，图 4.5 总结了这些近似法和其相应的 BPM 算法。

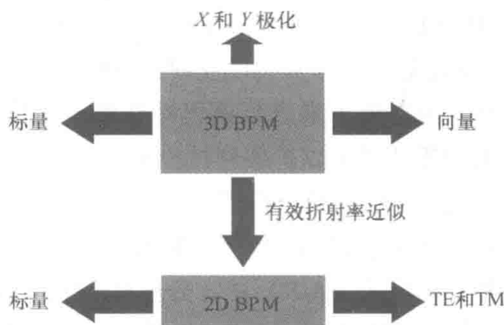


图 4.5　BPM 算法分类一览

4.2　BPM 算法

在本节中，我们对在各个文献中涉及的 BPM 算法做一个通览。我们将这些算法，按照采用何种近似法表示方程（4.12）中的指数算子进行分类。按照这一分类原则，BPM 法可以分为三类：特征模展开，矩阵展开，和分离算子法。分离算子法是一种非常高效的算法，但是其主要局限于用极化近似分析低折射率比的结构。另一方面，特征模展开和矩阵展开法，直接进行 3D 极化和向量化传播分析，并可以直接实现广角（Wide - Angle，WA）传播算法。对比矩阵展开法，特征模展开法，在分析纵向联接的均匀波导元时效率更高。矩阵展开法更适用于在纵向连续变化的波导中的光的传播。一般，特征模展开使用快速模式匹配或基于傅里叶法的模求解器。而矩阵展开法，主要采用 FDM 和 FEM。在处理缓慢变化和突变结构时，我们还可以混合使用各种方法，以兼取各方之长。Hayashi 等人[10]就结合了有限元特征模法（处理不连续的结构）和有限元矩阵展开 BPM（处理沿着传播方向缓慢变化的介质中的光传播）。

4.2.1　分步算子 BPM

历史上，第一个光束传播算法就是基于傅里叶分步步进法的分步算子法[11-14]。

该 BPM 算法将指数算子分步化为便于对角化。标准的分步法包括将算子 L——包含空间导数——从算子 $\omega^2\mu\varepsilon$ 中分离出来。极化近似下分离方程（4.12）的算子可得[11,12]：

$$\Phi(z_0+\Delta z)\approx\exp\left[\mp j\beta_r\frac{1}{2}\frac{L}{\beta_r^2}\right]\exp\left[\mp j\beta_r\frac{1}{2}\frac{\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}{\beta_r^2}\right]\Phi(z_0)$$

为了减小算子分步的误差（这是因为算子不能交换），分离步骤得到一个对称的形式：

$$\Phi(z_0+\Delta z)\approx\exp\left[\mp j\beta_r\frac{1}{4}\frac{L}{\beta_r^2}\right]\exp\left[\mp j\beta_r\frac{1}{2}\frac{\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}{\beta_r^2}\right]\exp\left[\mp j\beta_r\frac{1}{4}\frac{L}{\beta_r^2}\right]\Phi(z_0) \tag{4.13}$$

在 2D 标量化情况中，用傅里叶变换处理方程（4.13）的算子 L 是一种非常高效的 BPM 算法，即分步步进 FFT BPM。它的优势在于，在傅里叶空间中，方程（4.13）左边第一个算子（以及右边最后一个）是对角算子。所以，为了下一步计算场分布，需要接下来进行傅里叶变换，向量相乘，然后进行反傅里叶变换[11]。分步步进 FFT 法还可以扩展到柱坐标系[15]。不过，这种算法无法直接扩展到分析大折射率比波导的广角分析[16,17]。

同轴，全向量 3D 分步步进 BPM 算法综合了 FFT 法和 FD 法[18]。同样，通过结合交替方向隐式（ADI）法，分步算子法可以用于全向量（主要是同轴）3D 分析。这些算法可以将 3D 问题求解转换为 2D 问题的序列求解。因此，我们不用对复杂图形的系数矩阵求逆，而只需要对三个对角矩阵求逆即可。这一步骤可以用例如 Thomas 算法等非常高效率的完成。ADI 分步算子法成功适用于极化[19]和向量[20-22]情况，以及可以扩展到横向广角传播分析[23]。如果在子空间迭代法之前使用 ADI 法，则可以得到一个高效的向量化全广角算法[24]。必须注意的是，ADI 分步算子法的缺陷是稳定性差[20-22]。

Sharma 和 Agrawal[25]提出了一种分布算子 BPM 法可以应用于 3D 大角度分析。为了得到文献里提出的大角度算法，首先将方程（4.8）变为

$$\frac{\partial^2 G}{\partial z^2}=HG \tag{4.14}$$

其中

$$G=\begin{bmatrix}F\\ \partial F/\partial z\end{bmatrix}$$

$$H=\begin{bmatrix}0 & 1\\ -(L+\omega^2\mu_0\varepsilon) & 0\end{bmatrix}$$

然后，算子 H 分离为两个部分。参考文献［25－27］中有多种途径可以实现这一部。例如将算子 H 分离为如下两个部分：

$$H = H_1 + H_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -(L+\beta_r^2) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (\beta_r^2 - \omega^2\mu_0\varepsilon) & 0 \end{bmatrix}$$

然后，与分步步进 FFT BPM 相同，在对指数算子做分步后，方程（4.14）的解可以表示为对称形式：

$$G(z+\Delta z) = PQPG(z+\Delta z) + O((\Delta z)^3) \tag{4.15}$$

式中，$P = \mathrm{e}^{1/2H_1\Delta z}$，$Q = \mathrm{e}^{H_2\Delta z}$。在方程（4.15）中，算子 P 控制均匀空间内的传播，它可以轻松估计得到，而又因为算子 H_2 是等幂的，所以 Q 可以直接估计得到。最近，Sharama 和 Agrawal 对原始算法[25]进行了更新，使用 Magnus 展开得到了巨大的精度提升[28]。

4.2.2　本征模展开 BPM

本征模展开法可以直接实现极化和全向量法可实现的大角度传播分析。本征模展开法基于算子 $L+\omega^2\mu\varepsilon$ 可以由本征向量进行对角化这一性质。由此，方程（4.8）可以转换为如下形式：

$$\frac{\partial^2 F_t}{\partial z^2} = -\Gamma F_t \tag{4.16}$$

式中，$F_t = V^{-1}F$，$\Gamma = V^{-1}(L+\omega^2\mu\varepsilon)V$，含有特征向量 $L+\omega^2\mu_0\varepsilon$ 的一列 V 的本征值为 $L+\omega^2\mu_0\varepsilon$。方程（4.16）的解为

$$F_t(z) = \exp\left(\int(-\sqrt{\Gamma}z)\mathrm{d}z\right)F_t^F(z) + \exp\left(\int(\sqrt{\Gamma}z)\mathrm{d}z\right)F_t^B(z) \tag{4.17}$$

式中，上标 F 和 B 分别表示向前和向后传播的波。对单方向穿过波导的光，方程（4.17）可化简为

$$F_t(z_0+\Delta z) = \exp(-\sqrt{\Gamma}\Delta z)F_t^F(z_0) \tag{4.18}$$

在方程（4.18）中，因为 Γ 是对角元素，所以可以直接得到平方根的数值估计和对 F_t 的指数算子。故，该算法的难点都与高效计算算子 Γ、V 和 V^{-1}（对哈密顿矩阵表示 $L+\omega^2\mu_0\varepsilon$，有 $V^{-1}=V^H$，或 $V^{-1}=V^A$，其中 V^A 是共轭算子的本征向量）有关。因为 Γ 和 V 包含 $L+\omega^2\mu_0\varepsilon$ 的本征值和本征向量，所以问题简化为高效估计某一横截面传导模的传播常数和场分布问题，所以，最高效的本征模展开 BPM 法是基于在第 3 章讨论过的半分析法和分析法，如 MMM[29-31]或直线法[32]。这些方法都存在着 MMM 和 MOL 相同的缺陷，即它们都无法高效率的处理折射率分布连续变化的波导。对这些情况，使用 FDM[33]或 FEM[34]的本征模展开法效率更高。使用 FDM 的本征模展开 BPM，通常称为直线 BPM 法[35,36]。同样，使用 FEM 的本征模展开 BPM 称为直线 BPM FEM 法。本征模展开 BPM 需要非常大的计算机内存，存储所有的本征向量。为了解决这个问题，出现了一系列算法减少容器本征向量的数量。它们当中，Gerdes 提出的方法只挑选最重要的本征值和本征向量[38]。这个方法实际等效于矩阵展开 BPM 法挑选 WA 阶数，其计算精度取决于近似中保留的模数。

与模展开法类似，只用一部分本征模对光束传播做数值研究的一个方法是基于 Lanczos 化简的 BPM[39,40]。Lanczos 化简 BPM 的主要缺点，在于精确表达模谱特性中传导模和隐失模的模型稳定性较差[41,42]。为了解决这个问题，可以用 Arnoldi 法特带 Lanczos 法生成正交基底[43]。

使用模式展开 BPM 时，在解析窗口边界上的伪反射会造成较大的误差。为了避免这个问题，在计算波导传播常数和模的场分布时，必须引入合适的边界条件。例如，PML 的复坐标延伸可以减小模式展开 BPM 中得伪反射[44,45]。伪反射有关的问题，可以得到一个隐失模和连续辐射谱精确近似。通常，通过截断解析窗口并引入边界条件，离散化表示方程（4.14）中 L 算子谱的连续部分，可以解决这个问题。对低折射率比得结构，连续辐射模谱可以在选择合适的有效折射率情况下，由自由空间辐射模谱近似。然后，辐射模谱可以解析综合，其对应的传播场分布可以由算法[31]精确计算。

用傅里叶法[46,47]或质心坐标切比雪夫微分矩阵法[48]，也可以非常高效的计算特征模组。当建模结构含有一些连续波导区域，且每个区域的折射率分布不同时，用傅里叶法计算模谱有额外的优点，即它会得到一个互易 BPM 算法[49]。原本互易本征模展开 BPM 法只适用于 2D 解析。但最近，该方法经过发展，已可以进行 3D 解析[50]。

本征模展开法已经可以在柱坐标系下，对光锥[51,52]和光弯曲[53,54]进行分析，研究非线性光波导中的光传输[33]。本征模展开 BPM 也可以用于增益介质或损耗介质的分析，但是效率会降低[55]。

4.2.3　矩阵展开 BPM

除了个别情况[56]，矩阵展开 BPM 主要基于 FDM 和 FEM，代数表示方程（4.10）中的算子 L。因此，我们在下面只重点讨论者两种方法。

方程（4.10）和方程（4.12）可直接得出矩阵展开有限差分 BPM（FD-BPM）算法。为了用有限差分法直接求解方程（4.12），需要对算子 L、平方根和指数算子做近似。通常，可以用 FDM 特征模计算中相同的有限差分公式表示方程（4.12）的算子 L。因为在第 3 章中我们已经讨论过 FD 法，我们在这里不再赘述。不过，我们注意到，因为所得算法的互易性和稳定性（请参考 4.4 节“BPM 的数值求解”），可以用对称矩阵表示方程（4.12）的 L 算子。对标量情况，导数可以表示为标准三点 FD 模板（3D 情况为五点模板），从而可用对称矩阵表示 L。不过，对极化和向量情况，以及对 2D TM，不同折射率电介质的交界存在场不连续。这种情况下 FDM 会造成 FD 系数矩阵的对称性破坏[57-59]。当使用高阶 FD 近似时，该问题也会出现在 2D TE 情况中。不过，在 TE 情况中，可以推导出五点公式，其具有四阶精度且可以得到对称矩阵[60]。在 2D TM 中，可以用 Sigmod 函数用一个平滑函数近似大阶梯折射率分布[61]，从而消除不连续性。但是，极化和向量 3D BPM

分析中没有 FD 公式可以得到对称系数矩阵。

在 FD - BPM 中，指数算子可以用 Pade 极数[62]近似，在 Pade（1，1）近似中，对应了非常流行的 Crank - Nicolson（CN）格式[63]，而 Pade（n，0）对应了泰勒展开[64]。平方根算子可以由周期性 Pade 近似表示[65,66]，或者用更传统的直接展开式[67]，Thiele[68]近似（用连分数表示的 Pade 近似），和泰勒展开，其一阶项给出了非常流行的同轴格式。另外，方程（4.12）可以表示为[69]：

$$\Phi(z_0+\Delta z)=\frac{P(\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2})}{P(\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2})^*}\Delta z\Phi(z_0)$$

其中

$$P(\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2})=\cos\left(\frac{1}{2}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}\right)-\mathrm{j}\frac{1}{2}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}\times\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}\right)}{\frac{1}{2}\sqrt{L+\omega^2\mu_0\varepsilon-\beta_r^2}}\tag{4.19}$$

方程（4.19）可以用泰勒极数展开，得到一个无条件稳定算法，而不需要使用旋转近似[69]。

在 FD - BPM 中使用 CN 格式和同轴近似非常流行。这种算法可以在极化[70]和向量 BPM 仿真中，即可以用三分量[6]也可以用更高效率的两分量[71]公式实现。

基于 CN 格式的同轴 FD - BPM 的效率，可以通过引入 Douglas 格式[72]得到提升。Douglas 格式的难点在于，针对二维 TE 的算法无法用于 TM，因为它无法消除截断误差。所以，需要对每种特定的情况单独推导 Douglas 格式算法。而这还不是主要问题。文献中有众多道基于格拉斯格式的 BPM 算法。例如，对非均匀网格[73]，3D 极化和 3D 向量分析[74,75]的道格拉斯格式。

CN 和道格拉斯网格 BPM 的计算效率与如何求解线性代数方程组密切相关。对 2D 情况，一般用 Thomas 算法，对 3D 情况则用现代迭代法得到性能上的优化[76]。

在同轴近似下，显式法可以得到非常高效的算法。另一个优点在于，并行计算可以进一步提高显式法的计算效率。在 2D 情况中，显式 FD 法比基于 FFT 的方法在效率上更优[77,78]。特别是基于 DuFort - Frankel 算法的显式 BPM 有很高的效率。DuFort - Frankel 算法的主要缺点是伪模[80]，以及在计算增益或损耗结构时不稳定[81]。另外，基于迭代 CN 格式的显式法非常高效。与其他方法不同，该方法可以通过平方根算子的泰勒展开式，用于包括 WA 的分析[82]。

采用非均匀网格[83]，非正交坐标系[84-88]，和非笛卡儿正交坐标系[89-91]可以提高 FD - BPM 的效率。我们将在“BPM 应用实例”一节中详细讨论非正交坐标系的情况。

有限元矩阵展开 BPM（FE - BPM）表达式基于方程（3.4b）。到目前为止，

已有三种向量3D有限元BPM法。在Montanari等人[92]的著作中，使用三分量磁场表达式，加上零发散条件防止伪模的出现。在另一个三分量表达式[93]中，采用边元防止伪模。[94]中的两分量表达式，为用式（4.1b）表示的 x，y 磁场分量，由零发散条件消除了磁场 z 分量，也同时消除了伪模。所有的FE－BPM都采用周期算法生成平方根算子的Pade近似。FE－BPM的两一个优点是可以较直接的应用于各向异性介质[95－98]。

FE－BPM优于FE－BPM的方面是可以使用自适应网格[99]。还有一些研究者提出了向量FE－BPM，与向量FD－BPM不同，这个方法保留了光束的总功率。不过，Dang和Yevick严密的分析[100]推翻了这个方法。另一方面，FD－BPM，可以高效的实现大角度算法和指数算子的高阶近似。

4.3　双方向BPM

对平面光子器件，当平面光波导与另一平面光波导相接，如在平面光波导接光纤，或在平面光波导的终点处，导引的光波会遇到电介质不连续的情况（即电介质端面或镀层端面问题）。对这些情况，无法直接应用BPM。不过BPM可以分析不连续断面光波反射和透射。

4.3.1　对突变不连续的处理

为了推导介质不连续处的汇聚光、透射光和反射光，我们考虑图4.6中的问题。光从不连续面入射会一部分会发生反射一部分会透射。为了计算反射和透射波分布，需要推导出入射和反射的磁场电场的横向分量之间的关系。从方程（3.1），可以得到如下电场磁场横向分量的关系：

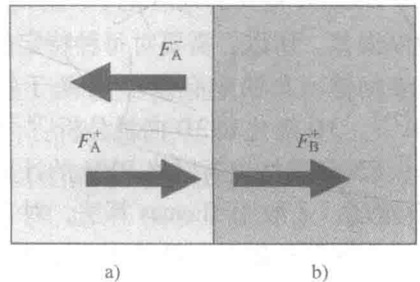


图4.6　介质a）和b）之间的不连续处的反射和入射波

$$\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix} H_y \\ -H_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{e11} & r_{e12} \\ r_{e21} & r_{e22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} \tag{4.20a}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{h11} & r_{h12} \\ r_{h21} & r_{h22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} H_y \\ -H_x \end{bmatrix} \tag{4.20b}$$

方程（4.20）可以改写为更紧凑的形式：

$$\frac{\partial \vec{H}_t}{\partial z} = jR_E\vec{E}_t \tag{4.21a}$$

$$\frac{\partial \vec{E}_t}{\partial z} = jR_H \vec{H}_t \tag{4.21b}$$

式中，$\vec{E}_t = \vec{i}_x E_x + \vec{i}_y E_y$，$\vec{H}_t = \vec{i}_x H_x + \vec{i}_y H_y$。矩阵元素 R_E 和 R_H 见表 4.1 ~ 表 4.3。

表 4.1　R_E 的元素

r_{eji}	$i=1$	$i=2$
$j=1$	$\omega\varepsilon + \frac{1}{\omega\varepsilon}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$	$-\frac{1}{\omega\mu_0}\frac{\partial^2}{\partial y \partial x}$
$j=2$	$-\frac{1}{\omega\mu_0}\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$	$\omega\varepsilon + \frac{1}{\omega\varepsilon}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

对 3D 极化 TE 和 2D TE 的情况，$\vec{E}_t$ 和 $\vec{H}_t$ 化简分别为 E_x 和 H_y。同样，对 3D 极化 TM 和 2D TM，$\vec{E}_t$ 和 $\vec{H}_t$ 可化简为 E_y 和 H_x。

由 4.21a 和 4.3b，可以得到电场和磁场横向分量之间的关系：

表 4.2　R_H 的元素

r_{hji}	$i=1$	$i=2$
$j=1$	$\omega\mu_0 + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}\right)$
$j=2$	$\frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\omega\mu_0 + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}\right)$

表 4.3　3D 极化和 2D 近似中矩阵（标量）R_E 和 R_H 的元素

	3D 极化 TE	3D 极化 TM	2D TE	2D TM
R_E	$\omega\varepsilon + \frac{1}{\omega\varepsilon}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$	$\omega\varepsilon + \frac{1}{\omega\varepsilon}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\omega\varepsilon + \frac{1}{\omega\varepsilon}\frac{\partial^2}{\partial y^2}$	$\omega\varepsilon$
R_H	$\omega\mu_0 + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}\right)$	$\omega\mu_0 + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}\right)$	$\omega\varepsilon$	$\omega\mu_0 + \frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\varepsilon}\frac{\partial}{\partial y}\right)$

$$\vec{E}_t = Z_E \vec{H}_t = \frac{1}{Y_E}\vec{H}_t = \frac{\sqrt{B + \omega^2\mu_0\varepsilon}}{R_E}\vec{H}_t$$

由方程（4.21b）和方程（4.3a），可以得到电场和磁场横向分量的另一个关系：

$$\vec{E}_t = Z_E \vec{H}_t = \frac{1}{Y_E}\vec{H}_t = \frac{R_H}{\sqrt{A + \omega^2\mu_0\varepsilon}}\vec{H}_t$$

考虑区域 A 和 B（见图 4.6）交界上的电磁场连续性，可以得到反射和透射算子：

$$F_{\mathrm{A}}^{-}=\frac{Y_{\mathrm{A}}-Y_{\mathrm{B}}}{Y_{\mathrm{A}}+Y_{\mathrm{B}}}F_{\mathrm{A}}^{+}=\frac{Z_{\mathrm{B}}-Z_{\mathrm{A}}}{Z_{\mathrm{A}}+Z_{\mathrm{B}}}F_{\mathrm{A}}^{+}=r_{\mathrm{AB}}F_{\mathrm{A}}^{+} \tag{4.22a}$$

$$F_{\mathrm{B}}^{+}=\frac{2Y_{\mathrm{A}}}{Y_{\mathrm{A}}+Y_{\mathrm{B}}}F_{\mathrm{A}}^{+}=\frac{2Z_{\mathrm{B}}}{Z_{\mathrm{A}}+Z_{\mathrm{B}}}F_{\mathrm{A}}^{+}=t_{\mathrm{AB}}F_{\mathrm{A}}^{+} \tag{4.22b}$$

在标量情况中，还需要标量位势及其导数连续，从而得到如下的入射、反射和透射波的关系：

$$F_{\mathrm{A}}^{-}=\frac{\sqrt{[L_{\mathrm{A}}]}-\sqrt{[L_{\mathrm{B}}]}}{\sqrt{[L_{\mathrm{A}}]}+\sqrt{[L_{\mathrm{B}}]}}F_{\mathrm{A}}^{+}=r_{\mathrm{AB}}F_{\mathrm{A}}^{+} \tag{4.23a}$$

$$F_{\mathrm{B}}^{+}=\frac{2\sqrt{[L_{\mathrm{A}}]}}{\sqrt{[L_{\mathrm{A}}]}+\sqrt{[L_{\mathrm{B}}]}}F_{\mathrm{A}}^{+}=t_{\mathrm{AB}}F_{\mathrm{A}}^{+} \tag{4.23b}$$

方程（4.22）和方程（4.23）表达式的估计法可以与 FFT 分布步进算法、模式展开 BPM 和矩阵展开 BPM 相融合。

FFT BPM 中进行估计算法由 Kaczmarski 和 Lagasse 提出[101]，Jin 等人将其推广到分析倒角端面[102]。在这种方法中，首先对入射波进行傅里叶变换，然后再对每个平面波用介质界面反射系数分别计算波分布。然后，再进行反傅里叶变换，得到反射波与一个空间相关系数相乘的形式[101,102]。目前，这个方法只能用于 2D 标量 TE 的情况。

另一方面，模展开法可以在标量、极化和全向量 3D 情况下用于评估方程（4.22）和方程（4.23）。用模展开计算折射率的最直接的办法，是用局部特征模线性组合表示不连续面两侧的场分布。然后，由正交关系，得到不连续面两侧线性组合系数的矩阵方程组[103,104]。对损耗或增益介质，模组并不正交，与模展开 BPM 相似，需要使用“共轭”波导模[105]。辐射模的连续谱，通常用模计算所用的方法做离散化处理。如果不连续面两侧的介质为同性介质，或较低的折射率比，则可采用一种特别高效的方法，即自由空间辐射法（FSRM）。在这些情况中，选择合适的有效折射率，辐射模谱可以近似为自由空间辐射模谱[106]。最近，FSRM 已可以应用于分析空气包层结构，如空气包层脊形波导[107]，以及联合矩阵展开 BPM，进行任意波导端面的分析[108]。

在矩阵展开法中，Pade 旋转展开可以估计平方根算子。所得的方程式可以用如 von Neumann 展开求解。当折射率不连续较严重时，会遇到收敛性的问题。这种情况下，可以用添加薄中间介质层[109]或用 BiCGSTAB 法[110]有效的补救。

最初，计算不连续界面波反射的算法只适用于 2D TE 情况。Chiou 和 Chang 将这一方法扩展到处理 2D TM 情况[111]。Helfert 和 Pregla 将矩阵展开法扩展到计算 3D 向量情况的界面反射性[112]。矩阵展开法的结果，与选择不连续面两侧参考折射率密切相关。真实参考折射率的选择，通常会导致在计算域边界出现假的场振荡。因此，当计算反射波分布时，需要使用复 Pade 近似[110,113]。

当入射波通过两个介质交界为曲面的情况时，模展开和矩阵展开法都需要应用阶梯近似。这会导致结果的收敛，随特征模数量或采样点数量的增加而变得非常缓慢。这一问题可以通过局部法线法（LNA）减轻[114]。LNA包括交界处场的匹配和曲面法线方向导数计算。Petruskevicius[114]的结果显示，应用LNA可以显著提高收敛速率。

当交界面不平行于坐标轴时，可以直接使用波动方程求解器。其电介质不连续性，与长平面缓变平面波导结构不同，相对较紧凑。因此，这种结构也可相对高效率的由直接波动方程求解器，使用标准数值方法，如FEM何FDM建模求解[115,116]。

4.3.2 对多次反射波的处理

BPM算法计算光在不连续面的透射和反射方法，是一种可以扩展到分析存在多个局部不连续面的缓变平面光波导结构的高效算法。该方法通常称为双方向BPM，如图4.7所示。

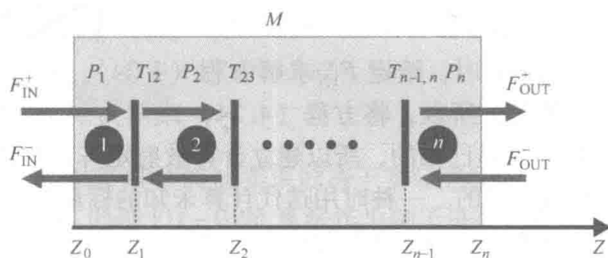


图4.7 多界面结构示意图（区域 i 的传播矩阵为 P_i，T_{ij} 为区域 i 和 j 的交界面矩阵。M 是总传输函数）

实际上，双方项BPM可以由方程（4.11）与方程（4.22）或方程（4.23）联立得到，为

$$\begin{pmatrix} F_{\mathrm{OUT}}^{+} \\ F_{\mathrm{OUT}}^{-} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} F_{\mathrm{IN}}^{+} \\ F_{\mathrm{IN}}^{-} \end{pmatrix} \quad M = P_n T_{n-1,n} \cdots P_2 T_{12} P_1 \tag{4.24}$$

其中 P_i 为

$$P_i = \begin{bmatrix} \exp\left(-\int_{z=z_i}^{z=z_i+1} L_i \mathrm{d}z\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\int_{z=z_i}^{z=z_i+1} L_i \mathrm{d}z\right) \end{bmatrix}$$

而其中：

$$T_{i,j} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 + L_j^{-1}L_i & 1 - L_j^{-1}L_i \\ 1 - L_j^{-1}L_i & 1 + L_j^{-1}L_i \end{bmatrix}$$

其中

$$L_i = \mathrm{j}\beta_{\mathrm{r}}\left(-\sqrt{1 + \frac{L + \omega^2\mu_0\varepsilon - \beta_{\mathrm{r}}^2}{\beta_{\mathrm{r}}^2}} + 1 \right)$$

由散射矩阵 S 和透射矩阵 T 的关系，可以从介质交界面散射矩阵 S 得到透射矩阵 T_{ij}[3]：

$$S = \begin{bmatrix} r_{12} & t_{21} \\ t_{12} & r_{21} \end{bmatrix}$$

$$T = \frac{1}{t_{12}}\begin{bmatrix} 1 & -r_{21} \\ r_{12} & t_{12}t_{21} - r_{21}r_{21} \end{bmatrix}$$

式中，r_{ij}和 t_{ij}由方程（4.22）到方程（4.23）给出。

当 F_{1N}已知时，可以由方程（4.24）直接计算 F_{OUT}。不过，对从图4.7 左侧入射的光，需要对当 $F_{OUT}^- = 0$ 时，给定 F_{1N}^+求解方程（4.24）。显然，从图 4.7 右侧光入射也于左侧入射等效。所以，将方程（4.24）改写为一个散射矩阵，就可以直接计算。而矩阵 M 不总是已知的，所以建立计算散射矩阵计算的算法并不容易。有两种方法可以实现这一目的。一种时用迭代计算未知的标量场，而不需要尝试计算散射矩阵。另一种方法为首先计算散射矩阵，然后由已知的入射场求散射场。

不考虑一般性，可以讨论当 F_{1N}^+不等于零的时候方程（4.24）的解。实际求解方程（4.24）的方法为 BPM 和方程（4.24）或方程（4.23）的求解算法相结合。所以，与 BPM 相似，双方向 BPM 算法求解方程（4.24）也使用分裂算子法、模展开法，或矩阵展开法。矩阵展开 BPM 一般会与迭代法结合，而本征模展开法则计算方程（4.24）的矩阵 M 和散射矩阵。

用模展开法可以计算方程（4.24）中的矩阵 M。由方程 $m_{21}F_{1N}^+ = m_{22}F_{1N}^-$可以得到反射波 F_{1N}^-，其中 m_{22}和 m_{21}为矩阵 M 的元素，即

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}$$

最后，透射波可由 M 和 F_{1N}相乘得[38,104,117]。Liu 和 Chew 提出了另一种方法[118]。在该算法中，迭代计算表示全反射和投射算子的矩阵。当这两个矩阵已知时，就可以通过简单的矩阵向量乘法，得到反射和投射波的分布。

在矩阵展开法中，矩阵 M 的显式形式破坏了矩阵的稀疏性（与矩阵展开 BPM 法类似，该方法使用有限差分或有限元，所以得到稀疏矩阵），所以会导致算法效率极低。实际算法，是基于初始入射场分布，推测反射波分布的。然后，在迭代更新散射波的分布，直到收敛[117]。不过，在折射率比较大的结构中，这个简单的算

法不稳定。在这种情况下，需要使用稳健性更好的算法，它们采用现代子空间投影迭代矩阵求解器，例如 BiCGSTAB 法，可以迭代计算散射场，而不会破坏稀疏性[117,119]。另外还有迭代双方向 BPM 算法，它不基于传输矩阵表达式（4.24）。该方法的一个例子是 Bremmer 级数法（BSM）。BSM 基于所求问题的积分方程表达式，而不是传输矩阵 4.24。使用冯纽曼技术可以迭代求解。在该算法中，第一步在每个不连续面检测反射。然后用背向 BPM，附加这些反射，构成反射波的第一次近似。然后再正向计算新的一组反射（参考 2.4 节“薄光学元件内的传播”）。然后重复这一过程直到收敛[68]。

在 2D 情况中，同样可以使用矩阵展开 BPM 算法（如 Liu 和 Chew[118]），迭代计算全反射和透射算子的矩阵表示[120]。同样也可以用双方向 BPM 算法解决特殊问题。例如，当子区域较小时，无法使用方向分解法。而 BPM 结合波动方程直接求解器，也是一种非常高效的算法。Yoneta 等人提出这种算法，并证明了它可以成功分析集成光学 T 形和交叉型分束器[116]。另一个有代表性的例子是周期性结构。在这种情况下，确定 Floquet 模可以显著提高算法的效率和稳定性[47,121-123]。

4.4 BPM 的数值实现

在本节中，我们考虑 BPM 算法实现的若干实际方法。为了讨论实际的 BPM 算法，我们首先以标量、同轴 FD - BPM 算法作为例子进行讨论。

为了推导同轴波动方程，我们首先定义解中的缓变复幅值 $\tilde{A}(x,z)$：

$$\tilde{U}(x,z)=\tilde{A}(x,z)^{*}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}n_{\mathrm{ref}}kz} \tag{4.25}$$

式中，n_{ref}为参考折射率，k 为波数。将式（4.25）带入标量方程（2.3），可得：

$$\frac{\partial\tilde{A}(x,z)}{\partial z}=-\frac{\mathrm{j}}{2n_{\mathrm{eff}}k}\left[\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}+(n^{2}(x,z)k^{2}-n_{\mathrm{eff}}^{2}k^{2})\right]\tilde{A}(x,z) \tag{4.26}$$

在缓变波包假设下，我们忽略方程（4.26）中 $\tilde{A}(x,z)$的二阶导数。我们注意到，我们从标量波动方程直接推导出了方程（4.26）。方程（4.26）还可以从方程（4.10）由同轴近似得出。

因为折射率分布时 x 的函数，所以我们无法用第 2 章的 FFT 算法求解方程（4.26）。而用 FFT 求 4.2 的数值解可以采用分步步进 FFT BPM。因为其与第 9 章将要讨论的分步步进 FFT 相似，所以我们不在这里讨论分步步进 FFT BPM。更详细的信息还可以在 Yamauchi[17] 和 Poon 和 Kim[124] 中找到。而我们在这里讲解参考文献［125］中的 FD - BPM 法。

如果在方程（4.26）中，我们对 x 的二阶偏导数用标准中心有限差分近似，选择沿 x 轴的计算窗口，并在窗口中以等间距 Δx 取采样点 x_i，方程 4.26 可以变为一组采样点 x_i，$i=1$，…，N 的常微分方程组：

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{A}(x_i,z)}{\mathrm{d}z} = -\frac{\mathrm{j}\Delta z}{2n_{\mathrm{eff}}k\Delta x^2}[\tilde{A}(x_i-\Delta x,z)$$
$$+\tilde{A}(x_i+\Delta x,z)+(n^2(x_i,z)k^2-n_{\mathrm{eff}}^2k^2-2)\tilde{A}(x_i,z) \tag{4.27}$$

在计算窗口的边缘，我们需要对 $\tilde{A}(x,z)$ 单独采样，这些采样不在前面的采样点集合中。我们假设这些采样点的值等于零，即，我们采用狄利克雷边界条件。最后，我们用矩阵代数将方程（4.27）表示为更紧密的形式：

$$\frac{\mathrm{d}\overline{A}(z+\Delta z)}{\mathrm{d}z} = \overline{M}\,\overline{A}(z) \tag{4.28}$$

式中，向量 $\overline{A}(z)$ 和矩阵 $\overline{M}$ 定义为

$$\overline{A}(z) = \begin{bmatrix} \tilde{A}(x_1,z) \\ \tilde{A}(x_2,z) \\ \tilde{A}(x_3,z) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\overline{M} = \frac{j}{2n_{\mathrm{eff}}k\Delta x^2}\begin{bmatrix} (n_1^2-n_{\mathrm{eff}}^2)k^2-2 & 1 & 0 & \cdots \\ 1 & (n_2^2-n_{\mathrm{eff}}^2)k^2-2 & 1 & \cdots \\ 0 & 1 & (n_3^2-n_{\mathrm{eff}}^2)k^2-2 & 1 \\ \vdots & \vdots & 1 & \ddots \end{bmatrix}$$

以及 $n_i^2 = n^2(x_i,z)$。

原理上，所有求解常微分方程组的标准数值算法都可以求解方程（4.28）。求解方程（4.28）的一种有趣的方法是应用欧拉法，它对 z 的一阶导数做了一个简单的近似：

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{A}(x_i,z)}{\mathrm{d}z} = \frac{\tilde{A}(x,z+\Delta z)-\tilde{A}(x,z)}{\Delta z}$$

从而可以得到一个显式算法，它通常用于求解扩散方程，在求解中在一定条件下稳定[126]。不过，方程（4.26）只与扩散方程类似，且它的显式格式并不稳定。对方程（4.28）用 CN 格式，可得：

$$\left(1-\frac{1}{2}\Delta z\,\overline{M}\right)\overline{A}(z+\Delta z) = \left(1+\frac{1}{2}\Delta z\,\overline{M}\right)\overline{A}(z) \tag{4.29}$$

方程（4.29）的数值解包括矩阵：

$$1+\frac{1}{2}\Delta z\,\overline{M}$$

和向量 $\overline{A}(z)$ 的逆矩阵：

$$1-\frac{1}{2}\Delta z\,\overline{M}$$

的乘积。全部 CN FD – BPM 算法总结在算法 4.1 中。

算法 4.1　CN FD – BPM

1. 开始；
2. 选择自由空间波长，并定义结构；
3. 设定传播距离 L；
4. 设定 N 个等距离 FD 采样点；
5. 初始化 $\tilde{A}(x, z)$；
6. 得到 z 处的折射率分布，选择 n_{ref}并由 4.29 计算 $\tilde{A}(x, z+\Delta z)$；
7. $z=z+\Delta z$；
8. 如果 $z<L$，跳转到步骤 6；
9. 停止。

始终需要注意的问题，是参考折射率的选择。BPM 计算精度与 n_{ref}的值密切相关。如何选择这个参数的一些一般指导如下所述。n_{ref}的选择首要应该满足乘积 $n_{ref}k$ 尽可能地接近传播波可能的传播常数。如果波导结构的折射率比较小，选择芯区折射率作为参考折射率就可以获得足够的精度。另一方面，还可以选择波导模的有效折射率，或者是 Rayleigh 商数：

$$k^2 n_{ref}^2 = \sum_{i=1}^{N} \tilde{A}^*(x_i,z)\left[\tilde{A}(x_i-\Delta x,z)+\tilde{A}(x_i+\Delta x,z)+(n^2(x_i,z)k^2)\tilde{A}(x_i,z)\right] / \tilde{A}^*(x_i,z)\tilde{A}(x_i,z)$$

我们将在“色散特性”中进一步讨论这个问题。

不过，采用 Rayleigh 商数和某个模的有效折射率，会带来额外的计算开销。以下 MATLAB 代码实现了算法 4.1：

```
% CN FDBPM propagation in two core slab waveguide
% ***********************************************************
% calculation modes for 2 core slab waveguide using FDs;
clear
format long e
pi = 3.141592653589793e+000;
i = sqrt(-1);

lam = 1.55;% wavelength in [micrometres]
k0 = 2*pi/lam;% wave number k0
nf = 3.3704;% refractive index in core 1&2
nf12 = 3.2874;% refractive index between core 1&2
ns = 3.2874;% refractive index in cladding
nc = 3.2874;% refractive index in substrate

dist_c = 4;
% distance to edge of the window in cladding [micrometres]
dist_s = 4;
% distance to edge of the window in substrate [micrometres]
t1 = 2;% core 1 thickness in [micrometres]
t2 = 2;% core 2 thickness in [micrometres]
dist_t12 = 2;% core spacing in [micrometres]
```

```
No_t1 = 10;% number of mesh points in waveguide core 1
dx = t1/No_t1;% dx in [micrometres]
No_c = dist_c/dx;% number of mesh points in cladding
No_s = dist_s/dx;% number of mesh points in substrate
No_t2 = t2/dx;% number of mesh points in waveguide core 2
No_t12 = dist_t12/dx;% number of mesh points between core 1 & 2
N_tot = No_c+No_t1+No_t12+No_t2+No_s;% total number of mesh
points
x = (1:N_tot)*dx;%vector with positions of FD nodes
c = 1/(dx*dx);
A = zeros(N_tot);% initialisation of matrix A
% setting off diagonals
for j = 1:N_tot
a1(j) = c;
a3(j) = c;
end
% setting up vector storing the values of refractive index
n = ns*ones(N_tot,1);
for j = 1:No_c
n(j) = nc;
end
for j = No_c+1:No_c+No_t1
n(j) = nf;
end
for j = No_c+No_t1+1:No_c+No_t1+No_t12
n(j) = nf12;
end
for j = No_c+No_t1+No_t12+1:No_c+No_t1+No_t12++No_t1
n(j) = nf;
end
% setting main diagonal of the matrix
shift = nf*nf*k0*k0;
a2 = ((n.*n*k0*k0-2*c)-shift);
A = spdiags([a1' a2 a3'], -1:1, N_tot, N_tot);
SIGMA = 'SM';
[X,D] = eigs(A,2,SIGMA);
'propagation constants of supermodes'
beta = sqrt(diag(D)+shift)
'effective refractive indices of supermodes'
neff = beta/k0
% ***********************************************************
% CN FDBPM
nref = nf; % reference refractive index
dz = 0.01;% propagation step [micrometres]
% setting main diagonal of the matrix M
shift = nref*nref*k0*k0;
a2 = ((n.*n*k0*k0-2*c)-shift);
M = spdiags([a1' a2 a3'], -1:1, N_tot, N_tot);
```

```
M = (-i/(2*nref*k0))*M;

M_prop1 = sparse(diag(ones(N_tot,1)))+0.5*dz*M;
M_prop2 = sparse(diag(ones(N_tot,1)))-0.5*dz*M;
N_steps = 10000;
E_init = X(:,1)/max(abs(X(:,1)));%initial field distribution
E = E_init;
for j = 1:N_steps
E = M_prop1*E;
E = M_prop2\E;
power(j) = sum(abs(E).^2);
j
end
```

该MATLAB代码处理的光束传播所在的结构，为一个10μm长的双芯区平板波导，芯区的厚度为2μm，两个芯区的间距为2μm。工作波长为1.55，芯区和包层的有效折射率分别为3.3704和3.2874。在计算域的边界采用狄利克雷边界条件。初始场分布对应了两个芯区平板波导的基模。

图4.8为$\tilde{A}(x,z)$采样点绝对值平方和与传播距离之间的关系：

$$|\bar{A}|^2 = \sum_{i=1}^{N} \tilde{A}^*(x_i,z)\tilde{A}(x_i,z)$$

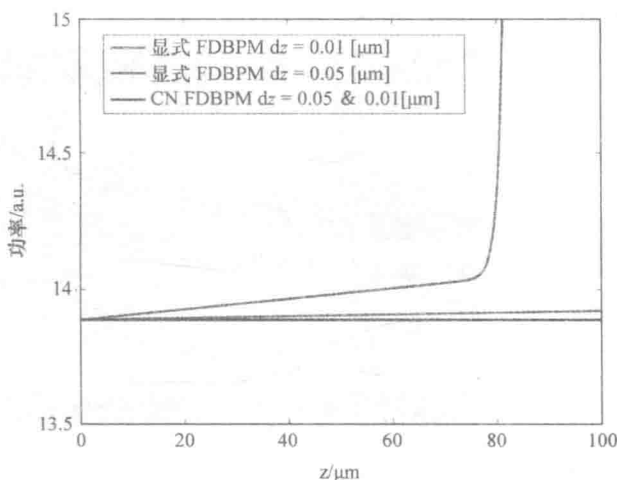


图4.8　光功率域传播距离的关系

（双芯区平面波导长为10μm，芯区的厚度为2μm，两个芯区的间距为2μm。工作波长为1.55，芯区和包层的有效折射率分别为3.3704和3.2874。初始场分布对应了两个芯区平面波导的基模）

在标量近似中，和表示波导导引的总光功率。因此，可以认为在狄利克雷边界条件的无损耗波导中，该性质不随距离改变。图4.8所示为CN－FDBPM的总功率和距离之间的关系。对比可知，添加了显式格式的功率和距离之间的关系。两个传播步长的值分别为$\Delta z=0.05$和$\Delta z=0.01$μm。$|\bar{A}|^2$的值只对C－N格式为常数。

对显式格式，当 Δz 等于 0.01μm 时，$|\bar{A}|^2$ 的值近似为常数。而当 $\Delta z = 0.05\mu m$，传播距离超过 80μm 之后，总功率开始快速增加，这表明显式算法的稳定性有明显的缺陷。还可以注意到，在 $\Delta z = 0.01\mu m$ 时，传播足够长的距离后，光功率还是会快速增加。实际上，CN 格式对 $|\bar{A}|^2$ 的值的限制非常重要，这也是为什么这种特殊的格式广泛用于 BPM 程序的原因。

在下面一节中，我们将讨论 BPM 算法在计算机上执行的重要问题。包括处理有限计算域空间产生的伪解（见图 2.10），BPM 算法的精度分析，和应用非政教坐标系消除台阶近似等问题。

4.4.1 边界条件

边界条件可以截断计算空间（如图 4.9 所示）。应用数值算法求电磁场边界值问题时，边界条件是必需的。在 BPM 仿真中，使用狄利克雷或牛顿边界条件截取计算窗口，会造成伪反射（请参考第 2 章）。所以，需要找到一种可以用有限差分、FEM，模式匹配或直线法的方法，可以在光波入射到计算窗口边界时，离开计算域，而不会产生伪反射。通常，BPM 有三种边界条件：透明边界条件（Transparent Boundary Condition，TBC），辐射（或吸收）边界条件（Radiation（or absorbing）Boundary Condition，RBC），和吸收层。

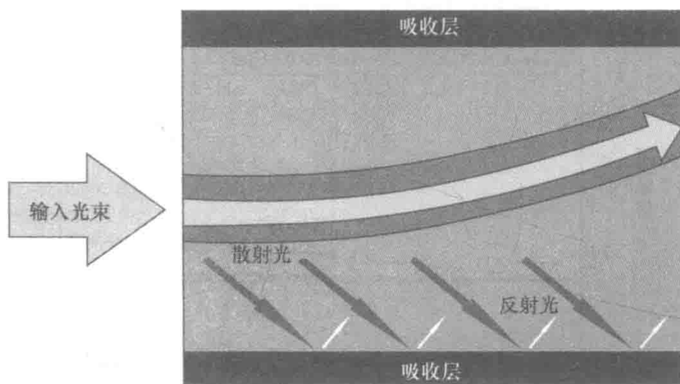


图 4.9　在计算窗口边界应用吸收层吸收散射光的示意

TBC 利用当前纵向位置上的场分布预测未来的场变化。TBC 最初由 Hadley 提出[172]，用于同轴 FD－BPM 计算。它假设在靠近计算域边缘处，场有一个近似平面波指数变化的趋势。这些年来，该边界条件已经成为 BPM 中最常用的边界条件。它应用非常简单，不需要向 FD 网格中添加额外的节点。不过，该方法对计算复杂的波形态，如两个发散的高斯光束，计算效率不太高。Song 在[128]中对 TBC 进行了一般化，与选用当前纵方向位置上的场分布不同，该方法利用所有前一个纵向场的采样点进行未来场变化的预测。不过，这种方法目前只适用于 2D 情况。

稳健性更好的边界条件为辐射边界条件。RBC 使用了特殊的湮灭算符。湮灭算符可以消除：一组特定入射角的后反射波[129]；入射角与反射角接近的反射波[9]；渐近远场展开的一些项[9]。RBC 在 FD - BPM 中会改变式（4.10）中矩阵 L 的稀疏性，这是因为有额外的点插入了某一给定点的有限差分方程所致。对 2D 情况，这种改变只存在于矩阵的第一行和最后一行，所以直接 LU 分解器的效率依然可以很高[129]。目前，辐射边界条件已经应用于 2D 和 3D 标量 FD BPM 分析中[130]。最近，利用求补算子的新 RBC 已应用于 FD - BPM。该方法利用两个求补算子作为边界条件两次推演场变化。然后，对计算得到的两个场结果去平均。其求补算子可以消除伪反射。该方法的缺陷在于，用求补算子做边界条件计算两次的时间长到可以重复一次仿真。

另一种边界条件利用特殊的吸收层消除散射光。吸收层放置在计算空间外面以吸收后反射溢出的伪反射光。吸收层中的衰减厚度足够大，以减小溢出光。同时，吸收层要介质匹配，以防止其自身产生伪反射。第一个吸收层是一个有复折射率的单层。其折射率的实部与相邻介质的折射率一致。其虚部用于消除伪反射[131]。消除伪反射效率更高的方法是采用 Berenger 全匹配层（PML）[132]。PML 为一个各向异性的损耗结构[133]。该方法稳健性非常好，可以非常高效的衰减大角度入射光在计算域边界上的反射。离开计算域的光，在 PML 中没有任何（镜面）反射，并不断衰减。事实上，PML 可以理解为是将实横轴映射到复平面，或者可以解释为是一种复坐标延拓[145]。虽然 PML 需要在计算中添加额外的节点，需要更多的计算机内存以容器系数矩阵，但它因为稳健性和实现简单，而成为当今 BPM 软件中采用的标准边界条件。PML 在用于进行 BPM 传播、不连续性分析，或模计算时效率也较高[44]。PML 也可以直接扩展到 3D 极化和向量分析应用。

Vassallo 和 Collino[134] 以及 Yevick 等人的文献[135] 中可找到用辅助设计优化 BPM 仿真的边界条件的解析表达式。

4.4.2　色散特性

用 BPM 算法研究平面波导中光的传播时，不会看到真实的介质色散特性，而只能得到一个近似的结果。这是因为 BPM 近似表示了 4.12 中的指数、平方根和 L 算子。

在本节中，我们将对 BPM 的色散特性数值化进行讨论。在均匀介质中，传播向量的横向分量与纵向分量呈平方根关系（参考第 2 章 2.9）。但是，如果只用 (n, n) Pade 近似以级数的形式近似平方根，则可得到如下的一个近似式（请参考“同轴和大角度近似”一节）：

$$k_z = k\sqrt{1 - \frac{k_x^2}{k^2}} \approx k\left(1 + \sum_{i=1}^{n} \frac{-a_{in}\frac{k_x^2}{k^2}}{1 - b_{in}\frac{k_x^2}{k^2}}\right) \tag{4.30}$$

式中，系数 a_{in}和 b_{in}为

$$a_{in} = \frac{2}{2n+1}\sin^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right),\ b_{in} = \cos^2\left(\frac{i\pi}{2n+1}\right)$$

（n，n）Pade 近似的性能与所研究的传播模和隐失模都有关系。另一些方法包括 Pade 展开以乘积的形式近似[136]，以及泰勒近似[68]或其他一些可以绕开平方根算子的表达式等[25,137]。我们下面首先对传播模的色散特性做相对详细的分析，然后讨论模谱中隐失部分进行讨论。

我们采用基于平面波分解的色散分析[138]。分析的起点是方程（4.12），它给出的当前纵向位置和下一个纵向位置的场的关系，即

$$\phi^{n+1} = Q\phi^n \tag{4.31}$$

式中，Q 为式（4.12）右侧作用于 $\Phi(z_0)$的算子，而 $\varphi^{n+1} = \Phi(z_0+\Delta z)$，$\varphi^n = \Phi(z_0)$。将 $\Phi(z) = \exp(k_z z + jk_x x)$带入式（4.30）可以得到一个特征值问题：

$$\nu\phi^n = Q\phi^n \tag{4.32}$$

方程（4.32）的特征值可以解析计算，而相应的传播向量 k_z 的纵向分量为

$$k_z = -1/\Delta z\ \mathrm{Arg}(\nu) \tag{4.33}$$

图 4.10 所示为用 CN 格式的 2D FD - BPM（即用［1，1］Pade 逼近表示指数算子）和（n，n）Pade 逼近表示平方根算子，计算的波向量 z 分量相对误差和传播角度之间的关系。计算得到相对误差为（$k_z - k_{exact}$）$/k$，其中 k_z 和 k_{exact}为计算得到的波向量 z 分量的精确值，而 k 为介质波数。第二个微分用标准三点有限差分格式逼近。本分析中，介质折射率为 3.262，是半导体激光器晶延的有效折射率典型值[139]。工作波长为 732nm。波向量横向分量比算出波传播角度。图 4.8 展示了高阶 WA 逼近平方根算子，得到的大角度传播的精确结果。不过，如果 FD 网格分辨率低，高阶 WA 网格没有特别的优点。WA BPM 和同轴网格的区别，只在 FD 网格分辨率足够高时才能体现。所以，使用高阶 WA 格式必须要求 FD 网格足够细，才能达到 WA 逼近阶数对应的可实现的最大精度。

用更高阶的有限差分逼近方程（4.12）中的微分算子 L，可以提高一个给定横向网格尺寸的精度。为了能说明高阶 FD 逼近的优点，我们用中心差分 5 点 FD 逼近算子 L 的第二个微分，重新计算了图 4.10 的结果。为了计算中心差分 5 点 FD 逼近，我们采用如下级数展开[140]：

$$D^2 = \frac{1}{\Delta x^2}\left(\delta^2 - \frac{1}{12}\delta^4 + \frac{1}{90}\delta^6 - \frac{1}{560}\delta^8 + \cdots\right)$$

式中，D 为微分算子，$-\mathrm{d}/\mathrm{d}x$，而 δ 为中心差分算子。图 4.11 所示为色散特性。结果显示，高阶 FD 逼近可以提高精度，特别是 FD 网格分辨率相对较低时。但当 FD 网格分辨率足够高时，即使用更高阶的 FD 格式或对 FD 网格做优化，也无法进一步提高精度。所以可以由此得出结论，对一个给定的 FD 逼近阶数，存在一个 FD 网格的值使精度达到最大。图 4.11 的结果显示，这个 FD 网格尺寸的值也与 WA

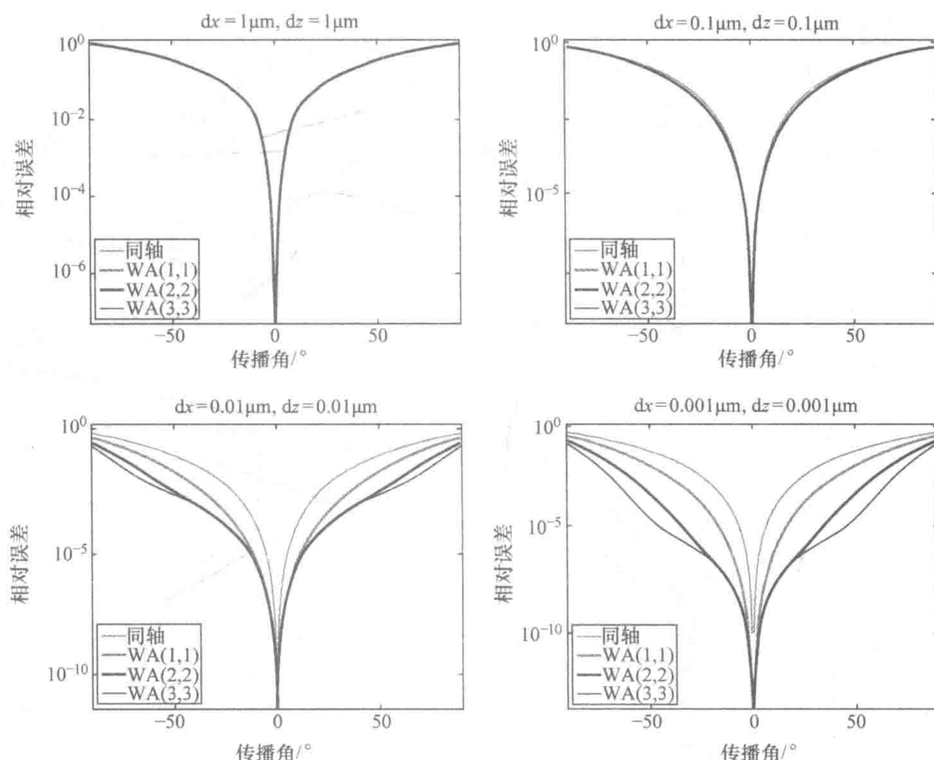


图 4.10　纵向和横向网格尺寸与同轴和大角度近似平方根算子的相对误差之间的关系
（介质折射率为 3.262，参考折射率等于该介质折射率，
工作波场为 0.732μm。对指数算子做（1，1）Pade 近似，对 L 算子做三点有限差分格式）

逼近阶数有关。

对一个给定步长的 BPM 算法，可以用高阶 Pade 逼近指数算子，提高其精度。图 4.12 比较了（2，2）和（1，1）Pade 逼近微分算子 2D FD－BPM 的计算结果。其他的所有仿真参数与图 4.10 相同。同样，增大大网格尺寸，可以提高精度。不过，高阶 Pade 近似在有限 FD 网格下不会有明显性能的提升。

在下一个实例中，我们考虑参考折射率对误差的灵敏度。这个问题很重要，因为在很多实际场合，在所有纵向相位不存在波动的情况下，很难计算参考折射率。例如，在 3D BPM 仿真中，局部模的有效折射率计算非常耗时，所以应该（最好）不做这样的计算。在研究多模传输时，例如，当研究 MMI 合路器的光学性质时，很难用单一的参考折射率值对所有模匹配纵向相位波动。图 4.13 所示为在参考折射率无法和介质折射率匹配相等时，2D FD－BPM 的波向量 z 分量的相对误差。其他的所有仿真参数与图 4.10 相同。介质的折射率和参考折射率之间的差显著增大，清楚的显示出参考折射率的不匹配。由图 4.13，可以确认如果参考折射率与介质折射率不匹配，则误差会很大，特别是对沿 z 轴传播的光。有趣的是，对同轴格

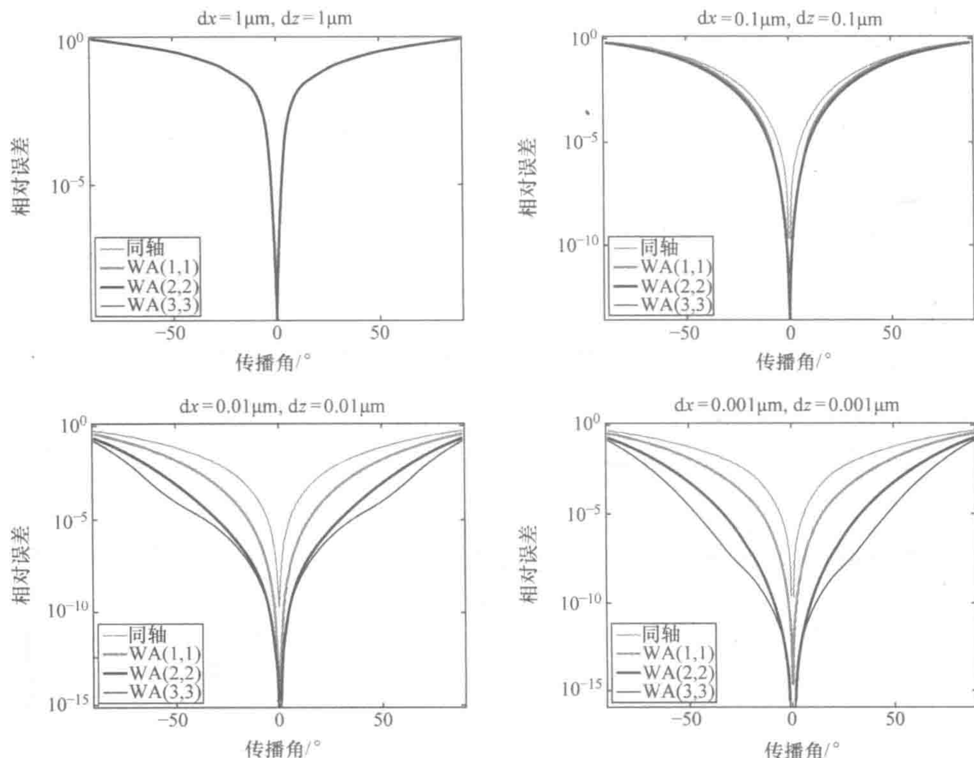


图 4.11 纵向和横向网格尺寸与同轴和大角度（WA）近似波向量 z 分量的传播角度相对误差之间的关系

（介质折射率为 3.262，参考折射率等于该介质折射率。工作波场为 0.732μm。对指数算子做（1，1）Pade 近似，对 L 算子做三点有限差分格式）

式，在优化网格后，这个误差还会增大。唯一减小这个误差的办法是用高阶大角度（WA）Pade 近似结合优化的 FD 网格，处理平方根算子。

由图 4.10 到图 4.12 可知，减小 z 方向大角度传播的光束的误差，只有通过高阶 WA 近似与优化的 FD 网格相结合。不过使用高阶 WA 和优化的 FD 网格的数值效率较低。另一方面，由 4.13 可知，虽然使用的是同轴近似，在大传播角度时也可能存在小的误差值。广义 BPM 算法（G－BPM）可以利用这一 BPM 的性质[141]。在 G－BPM 中，波包函数可以表示为任意传播方向与 z 轴夹角#的函数[141]：

$$F=\Phi\exp(-\mathrm{j}\beta\cos\theta z-\mathrm{j}\beta\sin\theta x)$$

将此波包函数代入式（4.9），可得到 G－BPM 算法[141]。图 4.14 所示为 G－BPM 传播角度在 $\theta=40°$－a）和 $\theta=80°$－b）情况下，与波向量 z 分量相对误差之间的关系。纵向和横向网格尺寸等于 0.1μm。介质的折射率为 3.262，与该介质的参考折射率相同。图 4.14 表示了低 FD 网格分辨率和低 WA 逼近阶数情况下，误差在传播角#附近也会减小。

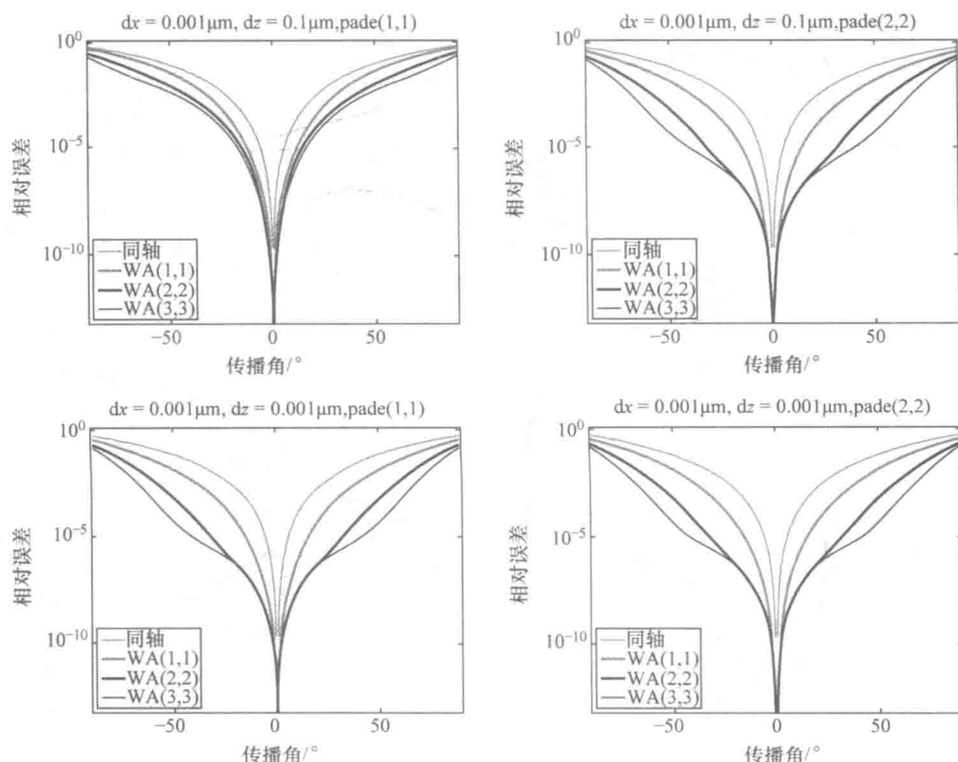


图 4.12　波向量 z 分量的相对误差与（1，1）和（2，2）Pade 近似指数算子的关系
（本例使用三点有限差分格式，介质折射率为 3.262，参考折射率等于该介质折射率，工作波场为 0.732μm）

到目前为止，我们已经讨论了用 BPM 研究传播模的误差。但是，很多时候，为了能给出一个预测性的结果，BPM 需要同时对传播和隐失模进行精确的建模。这是在实展开系数下，用标准 WA Pade 逼近近似平方根算子所无法做到的（参考“同轴和大角度近似”）。事实上，用标准 Pade 逼近平方根算子（和同轴近似）无法正确地对模谱隐失成分进行建模，这种错误的模型中，隐失模会像传播模一样传播（参考“同轴和大角度近似”）。其结果在处理反射时会出现非常大的误差[113,142]。为了能克服这个缺陷，研究者们提出了众多方法，其中大部分是基于声波传播研究的[143-148]。在光子学领域内，得到大范围应用的方法包括，用实展开系数的 Pade 逼近的同时，采用复值参考折射率（如通过旋转复平面）或旋转平方根分支切割。Rao 等人证明两种方法是等价的[142]。这些方法的优势在于，可以轻松实现任意逼近阶数的 BPM 算法。Petruskevicius 证明该方法实际上是将标准 Pade 级数的零点和极点移动到了复平面[114]。

最新的方法直接使用 Pade 逼近近似指数和平方根算子[147]。这种方法基于[$(p-1)/p$]Pade 逼近[149]，它对隐失模比标准的［p/p］逼近精度更高。不过，[$(p-1)/p$] Pade 逼近对传播模的精度不足。除此以外，还有 θ 近似但不等于 1/2 的 CN 格式方

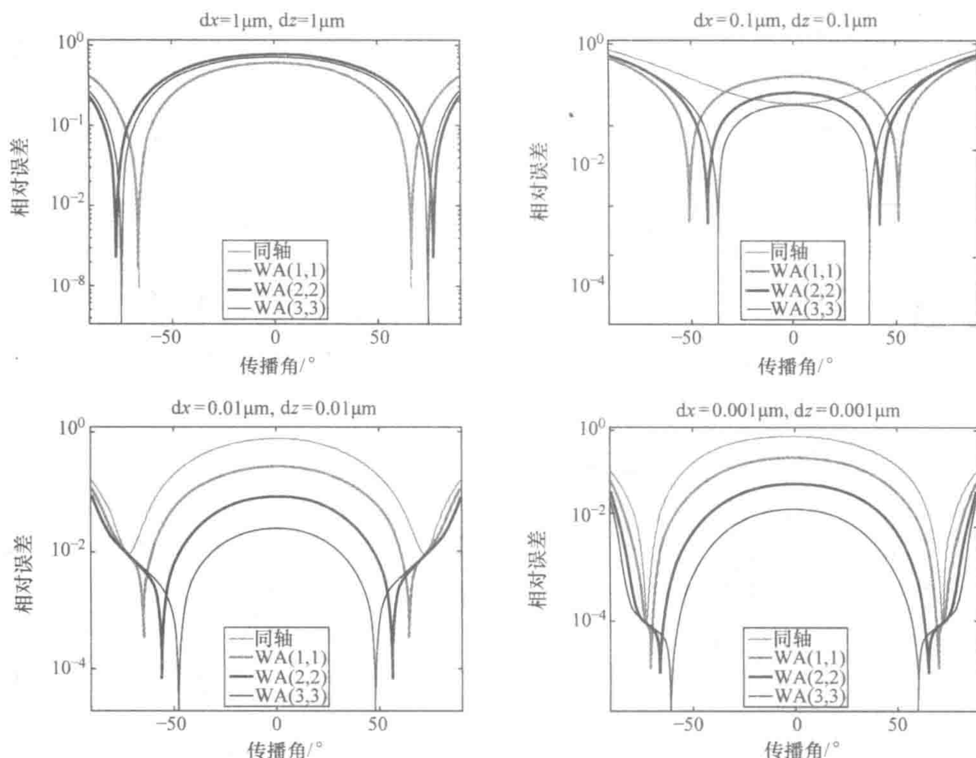


图 4.13 纵向和横向网格尺寸与同轴和大角度（WA）近似平方根算子与波向量 z 分量相对误差之间的关系
（介质折射率为 3.262，参考折射率等于 1，工作波场为 0.732μm，对指数算子做（1，1）Pade 近似，对 L 算子做三点有限差分格式）

法[150]。与 Lu 和 Ho 的研究[149]相似，这种方法可以计算隐失模，但是会压制传播模[150]。

另一个与 Pade 逼近有关的问题是 BPM 算法的稳定性。稳定性包括两个独立的问题。一个是使用 Pade 逼近 BPM 算法映射矩阵特征值。这种算法通常会最终求解代数方程，在理论上，Pade 展开系数会导致系数矩阵的一个特征值近似等于零。这会导致矩阵在求反时出现非常大的数值误差。这种误差会累积起来，导致数值不稳定[151]。另一个问题与复模的传播有关，并由 Pade 逼近影响到传播常数。无损波导中复模的性质可参考 Jablonski[152]。事实上，非对称矩阵表示式（4.10）中算子 L 的 BPM 仿真可以带入复特征值。这种情况在对 2D TE 使用高阶精确的 FD 逼近时也是可行的[153,154]。但这样的特征值会造成 BPM 算法不稳定[155]。这个问题在全向量 FD - BPM 算法中特别难处理，因为不能使用对称 FD 表示[155,156]。[155]提出了一些克服这一问题的方法。

最后，请不要将 BPM 算法的不稳定问题和 BPM 算法的能量守恒问题相混淆。

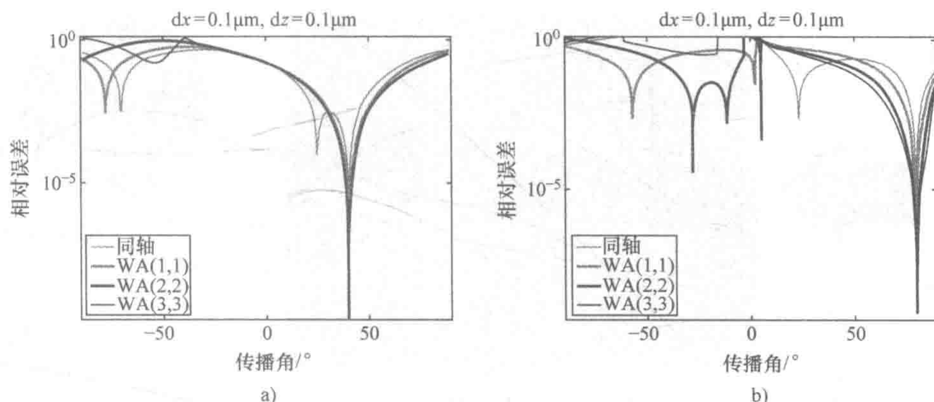


图 4.14　用广义 BPM 计算的传播角度与波向量 z 分量相对误差之间的关系

a）$\theta=40°$　b）$\theta=80°$

（纵向和横向网格尺寸等于 0.1μm，介质折射率为 3.262，参考折射率等于介质折射率）

电场和磁场的全向量 BPM 仿真，可以在公式上证明是能量守恒的[157]。不过，对这两个场应用带复特征值的 BPM 算法计算也会出现不稳定的问题[158]。有关 BPM 仿真能量守恒的讨论请参考 Tamauchi[17] 和 Vassallo[159]。

4.4.3　阶梯化近似

当不同折射率值的区域边界不平行于坐标轴时，需要做阶梯化近似。例如，在直角坐标系中用 BPM 对倾斜波导中的光束传播、弯曲的光波导或光锥进行分析时会出现这种情况。图 4.15 所示为阶梯化近似的思路，用一系列阶梯近似两个不同折射率区域的曲面边界。当在 BPM 中使用阶梯化近似时，计算场分布时会出现伪散射[87]。若干种方法可以消除这个现象。其中一种方法采用了高级 FD - BPM 格式[160]。另一种方法，用一个特殊的坐标系，使得折射率分布的变化与光束传播一致。这个方法既可以用正交坐标系，也可以用非正交坐标系。正交坐标系实现相对简单，不过无法直接对接直角坐标系[51]。共形映射可以解决这个问题。但是，共形映射不会减小阶梯化，且只针对在 2D 情况[161]。最近，出现了一种能量守恒 BPM 算法。可以逼近倾斜壁的曲面交界[162]。不过，这些技术目前都只能用于 2D TE。另一方面，非正交坐标系的 BPM 消除了阶梯化，可以直接与正交坐标系的标准 BPM 对接。不仅如此，非正交坐标系可以简单应用到 3D BPM 算法中，并可以适应传播计算中的计算窗口大小和位置[87]，这是直角坐标系很难实现的（目前只做到平移计算窗口[163]）。

广泛用于平面波导结构分析的非正交坐标系有两种，它们是锥坐标系和斜坐标系。在本节中，我们将分别推导和分析两种坐标系的 BPM 算法。为了简单明了起见，我们只讨论 2D TE 情况。有关 3D BPM 的讨论，可以参考 Sujecki 等人的

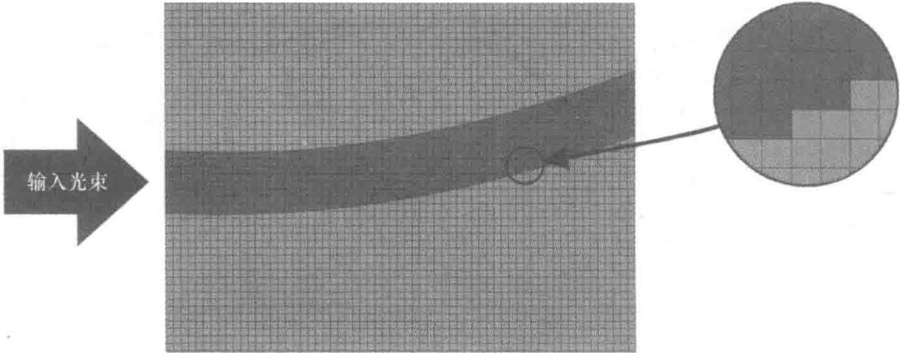


图 4.15 弯曲光波导的阶梯化示意图

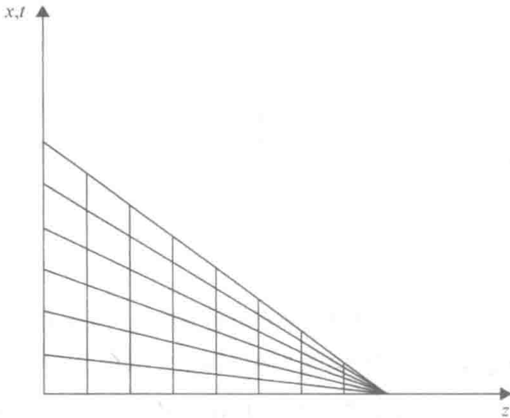


图 4.16 锥坐标系

文献[87]。

首先，我们考虑锥坐标系下的 BPM。Sewell 等人提出了锥坐标系 BPM[87]。锥坐标 t 和 z 用直角坐标系的 x 和 z 表示为：$x=tz$ 和 $z=z$（如图 4.16 所示）。在替换式（4.9）的变量后，我们可以得到单方向锥坐标系波动方程：

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}-\frac{t}{z}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(t,z) = \pm \mathrm{j}\ \sqrt{L_{\mathrm{t}}+\mu_0\varepsilon\omega^2}\psi(t,z) \tag{4.34}$$

其中 L_{t} 为

$$L_{\mathrm{t}}=\frac{1}{z^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

在引入波包函数 Φ 之后，其与 ψ 的关系为 $\psi=\Phi\exp(-\mathrm{j}\beta z)$，方程（4.34）可以写为如下的形式：

$$\frac{\partial}{\partial z}\varphi(t,z)=\left(\frac{t}{z}\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{j}\beta\left[\sqrt{1+\frac{L_t+\mu_0\varepsilon\omega^2}{\beta^2}}-1\right]\right)\varphi(t,z) \tag{4.35}$$

方程（4.35）可以通过类似直角坐标系的 BPM 的方法，用于推导锥坐标的 BPM 算法[87,165]。注意在锥坐标系中，还可以使用另一个波包函数，更好的拟合波振面的相位变化[87]。

同样，在斜坐标系中（如图 4.17 所示），变量 t 和 z 对应了直角坐标行的 x 和 z，它们的关系为：$t=x-z\tan\theta$ 和 $z=z$[166]。在对式（4.9）中变量做代换后，可以得到斜坐标系下的单方向波动方程：

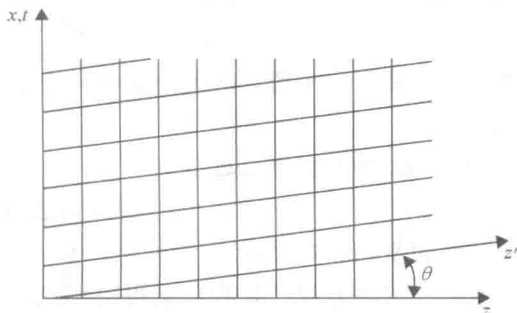


图 4.17　斜坐标系

$$\left[\sec^2\theta\frac{\partial^2}{\partial t^2}-2\tan\theta\frac{\partial^2}{\partial z\partial t}-2\mathrm{j}\beta\cos\theta\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2-\beta^2\right]\psi(t,z)=0 \tag{4.36}$$

我们注意到，在斜坐标系下可以通过变量代换：$t=x-z\sin\theta$ 和 $w=z\cos\theta$ 得到 BPM 的另一种表达式[86]。方程（4.36）可以变换为更普通的形式[165]：

$$\left(\frac{\partial}{\partial z}-\tan(\theta)\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(t,z)=\pm\mathrm{j}\sqrt{L'+\mu_0\varepsilon\omega^2}\psi(t,z) \tag{4.37}$$

其中算子 L' 为

$$L'=\frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

引入波包函数后，与 Φ 的关系为

$$\psi=\phi\exp\left[-\mathrm{j}\left(\frac{\beta}{\cos(\theta)}\right)+\beta\sin(\theta)t\right]$$

我们从方程（4.37）可得到波包函数 Φ：

$$\frac{\partial}{\partial z}\varphi(t,z)=\left(M_o-\mathrm{j}\left[\sqrt{-M_o^2+L_o}\right]\right)\varphi(t,z) \tag{4.38}$$

式中，算子 L_o 和 M_o 为

$$M_o=\mathrm{j}\beta\cos(\theta)+\tan(\theta)\frac{\partial}{\partial t}$$

$$L_o=(1+\tan(\theta))\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\mu_0\varepsilon\omega^2-\beta^2$$

方程（4.38）可以再一次通过类似直角坐标系的 BPM 的方法，用于推导斜坐标的 BPM 算法[167]。

需要注意的是，非正交坐标系可以设计为满足任意介质边界形状[85,87,88,168]。

所以，非政教坐标系的 BPM 可以认为是一种标准直角系 BPM 的广义化。非正交系 BPM 的若干种应用实例可参考“BPM 应用实例”一节。

同样的，在直角坐标系内基于平面波分解的色散分析[138]，也可以通过斜坐标系 BPM 实现。设解的形式为

$$\varphi^n(u,z)=\mathrm{e}^{-\mathrm{j}su}=\mathrm{e}^{-\mathrm{j}s(x-z\tan\theta)},\ s=k(\sin\varphi-\sin\theta)$$

带入与当前和下一个位置的场分布有关的方程，可得到一个特征值问题：

$$\nu\,\underline{P}\varphi^n=Q\varphi^n \tag{4.39}$$

方程（4.39）的特征值通过：

$$\beta=-1/\mathrm{d}z\ \mathrm{Arg}(\nu)$$

对应了波向量的纵向分量。

所以，求解方程（4.39）就可得到色散特性。

为了展示斜坐标系下 BPM 的优点，我们用斜 FD－BPM 算法计算了波向量纵向分量（z）与传播角度 a）$\theta=20°$，b）$\theta=50°$c）$\theta=90°$之间的关系[167]（如图 4.18 所示）。纵向和横向网格尺寸为 0.1μm，介质折射率为 3.262，参考折射率等

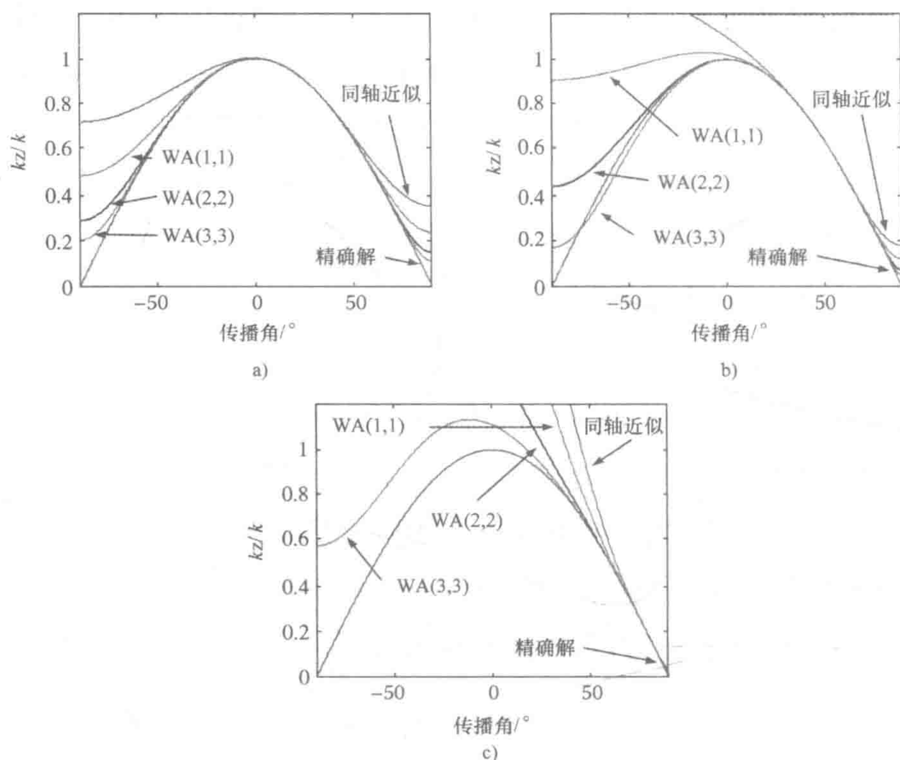


图 4.18　斜 FD－BPM 算法计算了波向量纵向分量（z）与传播角度之间的关系，纵向和横向网格尺寸为 0.1μm，介质折射率为 3.262，参考折射率等于该介质折射率

a）$\theta=20°$　b）$\theta=50°$　c）$\theta=90°$

于该介质折射率。图 4.18 的结果显示，选择合适的斜坐标角度 θ、大角度近似阶数（与 G－BPM 相似），在斜坐标系下的 BPM，可以在低阶大角度近似和适中的有限差分网格尺寸下，覆盖任意角度范围。其他有关非正交坐标系下 BPM 性质的讨论，请参考 4.5 节“BPM 应用实例”。

4.5　BPM 应用实例

每个光子器件都可分解为若干较简单单元的组合。而每个单元由可以由各自的建模方法单独设计。这些方法可以显著的减少所需的计算资源。若干种常用于光子器件的单元为直的或斜的波导、弯曲波导、锥形波导和 Y 形分叉（如图 4.19 所示）。

直的和斜的波导、曲波导，锥形波导，和 Y 形分叉的建模方法都可以在扩展文献中找到。在本节中，我们对应用 BPM 分析这些光子器件的单元进行讨论。讨论基于若干 BPM 应用实例进行。

4.5.1　光锥

锥形光波导在若干空间模式变换和高功率锥形激光器以及放大器中都有应用，以减少给定输出光功率水平下的光子密度。标准坐标系下，用不可分离变量的波动方程，对锥形结构做高精度分析很复杂。对光锥进行分析的一种方法是基于本征锥形模[169]。本征锥形模的思路可以帮助理解物理意义，不过其分析方法目前只适用于 2D 情况。另外，对一些锥结构，可以用保角映射，但它同样只针对 2D 情况[83]。经典方法用一个连续的直变宽波导近似锥结构进行分析。这种近似结构可以用简正模法分析。场分解为给定横截面的传导模之和，而在不同宽度波导的交界面上的传播可以用重叠积分计算[170]。简正模法只在锥形的变化是绝热的情况下效率较高。同样，模展开 BPM 对一般光锥结构效率较低。这是因为每一步都需要计算全模式谱，这会占用大量计算资源，特别针对 3D 情况。另一方面，矩阵展开 BPM，可以更直接和高效的计算均匀变化和非均匀变化的锥结构。

通过引入非正交锥坐标系，可以进一步提高矩阵展开 BPM 的效率。将问题用锥坐标表示，沿着不同折射率介质的边界，执行算法计算，就可以用很少的采样点足够精确的描述出物理光路[84]。该方法允许相对较粗糙的横向网格和较大的传播步长，从而很大程度地降低了所需的计算开销。此外，在锥坐标系下进行计算，可以很大程度减小直角坐标系 BPM 仿真出现的数值噪声。除此以外，也可以用正交坐标系进行光锥分析。但是，柱坐标 BPM 无法直接和标准直角坐标系 BPM 对接。

图 4.20 对照了直角和锥坐标系 BPM 计算的场强分布。空气包层光锥长 22.9μm，宽度从 0.4μm 变化至 0.8μm（见图 4.21）。芯层折射率和衬底折射率分别为 3.3 和 3.17。工作波长为 1.55μm。结果按输入场分布的最大场强进行了归一

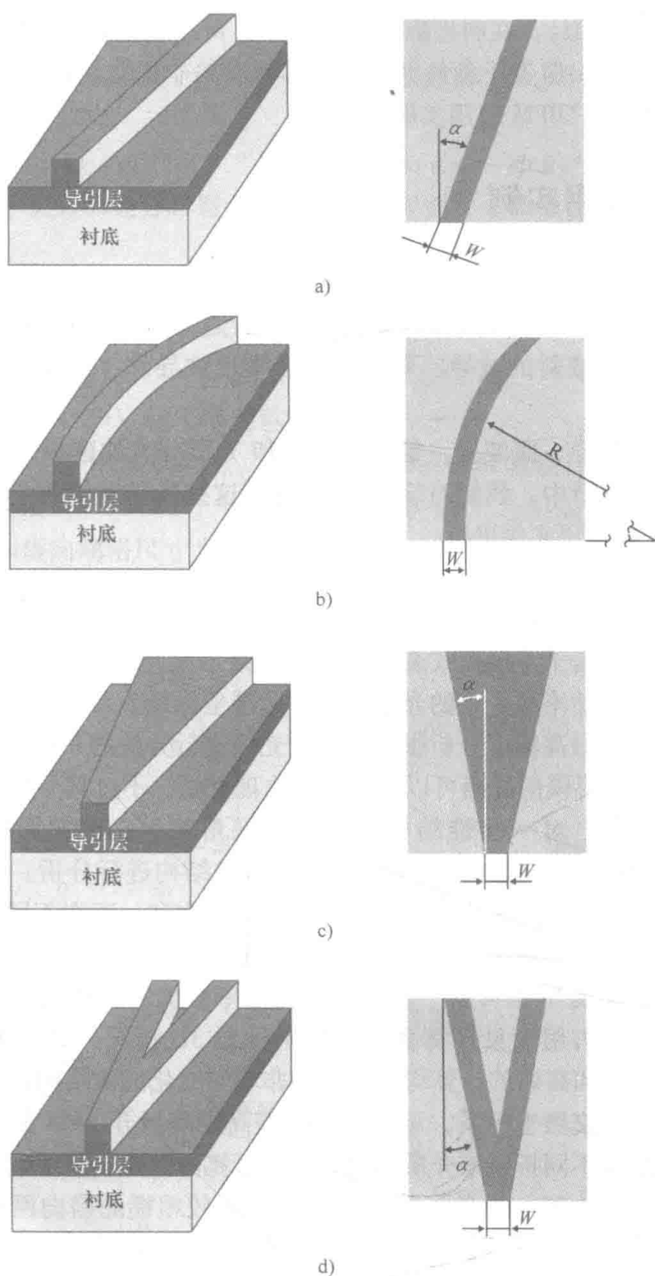


图 4.19 平面工艺光器件中的基本单元示例
a）斜脊形波导 b）弯曲脊形波导 c）锥形脊形波导 d）Y 形分叉

化。在等场强图中，定场强线从最大 0.1 开始，以 0.2 增加。直角坐标系 WA -

BPM 结果中出现的非物理数值噪声，只能通过选择非常合适的横向网格尺寸减小。而锥坐标系 WA - BPM 的结果中，即使 FD 网格较粗糙，数值噪声也可以足够小[87,164,165]。

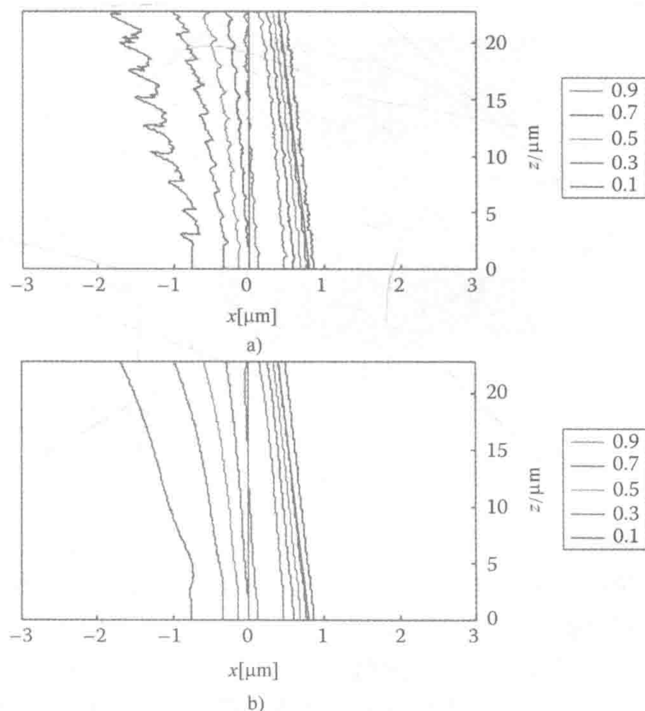


图 4.20　空气包层锥形结构的等值线图

（由直角（1，1）a）WA - BPM 和锥形（1，1）　b）WA - BPM 计算得到，$H = 0.8\mu m$，$h = 0.4\mu m$，$L = 22.9\mu m$，$n_1 = 1$，$n_2 = 3.3$，$n_3 = 3.17$，$\lambda = 1.55\mu m$，纵向和横向网格尺寸分别等于 $0.229\mu m$ 和 $0.04\mu m$）a）直角（1，1）WA - BPM　b）锥形（1，1）WA - BPM

4.5.2　斜波导和弯曲波导

光弯曲波导用于改变光束传播的方向。弯曲波导中的光束传播会伴随着光损耗、离轴相移和偏振旋转[172,173]。均质波导的弯曲损耗有若干种近似方法可以计算。Kim 等人的文献[173]中给出了一个实用的总结。近似方法的主要问题是它只能用于均质、圆弧状弯曲结构。

对圆弯曲波导，可以写出特征值矩阵方程并求解向量特征模的传播常数[174]。该方法效率较高，但是只能处理标准的圆弯曲波导。对低折射率比结构，自由空间辐射模法可以非常高效的处理圆弯曲波导[175]。另一方面，BPM 法，可以轻易通过曲线坐标系分析任意形状弯曲的波导[176]。BPM 也可以在局部柱坐标和扇坐标

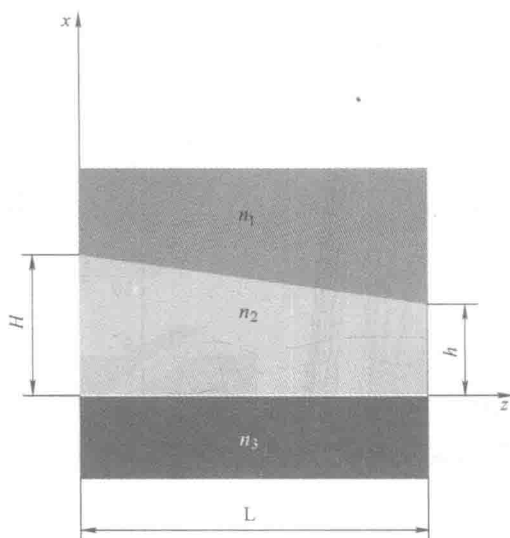


图 4.21　非对称 2D 锥形结构

系下，高效的分析圆弯曲波导[168,177]。实际上，对大半径低损耗的弯曲，一般用直波导近似。这种近似方法将弯曲波导内的光束传播，转化为直波导内的光束传播附加适当修正的横向折射率分布的形式[178]。

当低折射率比波导只转动了很小的角度时，直角坐标系的标准 BPM 是效率最高的算法。这种弯曲存在于如弯曲波导半导体激光器谐振腔结构中，用于提升光束质量，提升线性区工作的最大偏置电流[179]。不同于阶梯近似，弯曲波导可以由斜波导组合进行近似（如图 4.22 所示)，并由非正交坐标系的 BPM 进行分析。

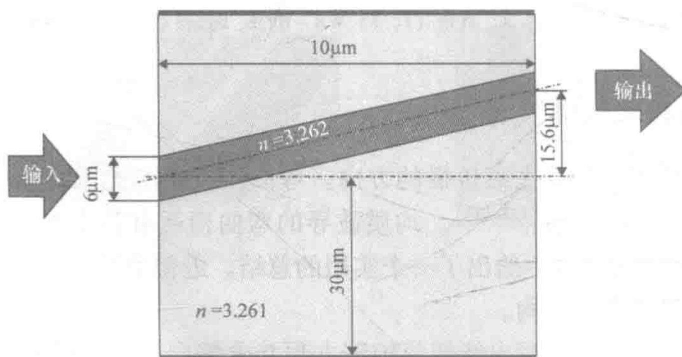


图 4.22　斜波导结构示例

斜光波导在光子器件中的应用，例如定向耦合器。因为数值色散的存在，无法直接对斜波导中的光束传播进行建模[180]。当倾角较大时，必须使用高阶 Pade 近似平方根算子。而且，在使用阶梯近似时，在场分布中还可能出现伪数值噪声。消除这种噪声比较困难，特别是对高折射率比的波导。不过，采用倾斜坐标系后，可以用同轴 BPM 对斜波导中光束传播，甚至是大导引倾斜角的光束传播进行建模[86,166]。

举例说明，让我们考虑一个如图 4.22 所示的倾斜波导结构。基模沿着波导传播，即传播角等于波导的倾角。因此，可以推断，精确计算出的模场分布最大值应该出现在波导的中心。计算窗口宽度为 60μm，波导宽度为 6μm，沿着 z 轴的传播距离为 10μm。输出的波导偏移量大约为 15.6μm（波导倾角为 1 弧度）。工作波长 λ 为 732nm，芯层折射率为 3.262。包层波长为 3.261。所有计算假设零场位于计算窗口的边界，而计算窗口已足够大，不会对结果产生显著影响。

图 4.23 所示为测试结构输出处的场偏移（见图 4.22）与 WA 阶数、网格尺寸对应的倾斜坐标系角度 θ（见图 4.17）之间的关系，其中 $\theta=0$（见图 4.23a）对应了直角坐标系，而 $\theta=0.5$ 弧度对应了倾斜坐标系（见图 4.23b）。横向和纵向网格尺寸为 0.05μm。场偏移量定义为光强最大值处到计算窗口中心之间的距离（精确的结果中，场最大值应位于波导的中心）。图 4.23 显示，传播角度的误差无法单纯通过增加 BPM 大角度阶数而减小。为了显示出高阶大角度 BPM 的优势，增加精度，需要对 FD 网格进行优化。选择合适的 FD 网格尺寸和 WA 阶数后，倾斜 BPM 收敛较快，显示了选择传播方向贴近实际功率流动方向的好处（见图 4.23）。

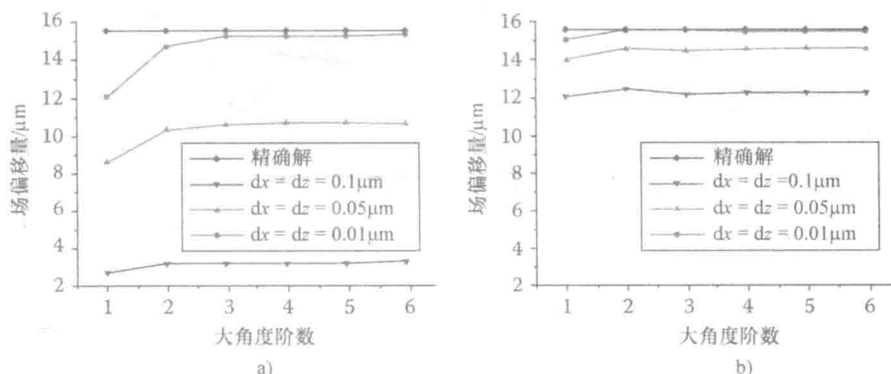


图 4.23　图 4.22 结构的场偏移量与大角度近似阶数的关系

a）$\theta=0$ 弧度　b）$\theta=0.5$ 弧度

图 4.24 所示为倾斜坐标系中，对一个给定倾斜角 θ（见图 4.17），输出处的场偏移量与 WA 阶数之间的关系。横向和纵向网格尺寸为 0.005μm。其结果进一步显示了自由选择传播方向的好处。即使倾斜坐标系倾斜角 θ 比波导倾斜角小，倾斜

坐标系下的收敛速度也可以得到足够的提高。

4.5.3 Y形分叉波导

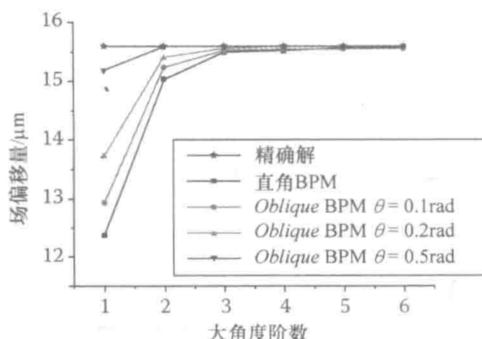


图4.24 图4.22结构的场偏移量与大角度近似阶数的关系（纵向和横向网格尺寸为0.005μm）

Y形分叉波导用于分路器，合路器，调制器和Mach - Zehnder干涉仪。Y形分叉波导可以用多种数值方法继进行分析。最直接的方法基于简正模理论[181-183]。对2D情况，该方法可以推导出阶梯折射率Y形分叉波导的解析表达式[184]。但是，这种方法[181-185]只对2D情况有较高效率，而且除了Cascio等人[182]和Kuznetsov[185]的方法之外，都不包含辐射模谱分析。另一方面，矩阵展开BPM，可以直接应用于任意折射率分布的Y形分叉波导，且进行全3D向量分析。在直角坐标系下，BPM无法准确地对不同折射率介质有倾斜边界的情况进行建模；这种情况需要做阶梯化近似。直角系BPM计算存在非物理噪声。另一方面，非正交BPM算法可以对斜边界进行准确的建模。可以在低网格分辨率下进行精确的计算。

在Sewell等人文献[85]中，采用了双-斜坐标系分析Y形分叉。而如果将锥坐标和双-斜坐标系相结合，可以得到更高效率的算法[88]。

在示例中，我们用非正交BPM做Mach - Zehnder干涉仪的2D分析（如图4.25所示）。Mach - Zehnder干涉仪一般作为幅度调制器使用。输出光的幅度受到，如干涉仪两个臂上所加电压的控制。由电光效应，使得干涉仪两个臂内通过的光的路径不同。从而在输出出现相长或相消干涉。一个Mach - Zehnder干涉仪由直波导、锥形波导，和Y形分叉组成，它非常适合使用BPM进行分析。

我们研究的图4.26中的Mach - Zehnder干涉仪的尺寸为：$L_1=4\mu m$，$L_2=L_6=125\mu m$，$L_3=L_5=1000\mu m$，$L_4=2256\mu m$，$L_7=160\mu m$，$W_1=W_5=1.5\mu m$，$W_2=W_4=3\mu m$，$W_3=3\mu m$，以及$O=5.4\mu m$。工作波长为$1\mu m$，$n_1=1.01$，$n_2=1.0$。FD网格尺寸如图4.26所示。器件建模使用了直角、锥、双-斜，直角、双-斜，直角坐标系BPM算法进行建模。

其结果与相同横向网格和相同输入的直角系BPM做了对比。图4.27对比了两种算法计算的结果。可以看到，在给定的网格尺寸下，非正交系BPM的数值噪声比直角坐标系要小。

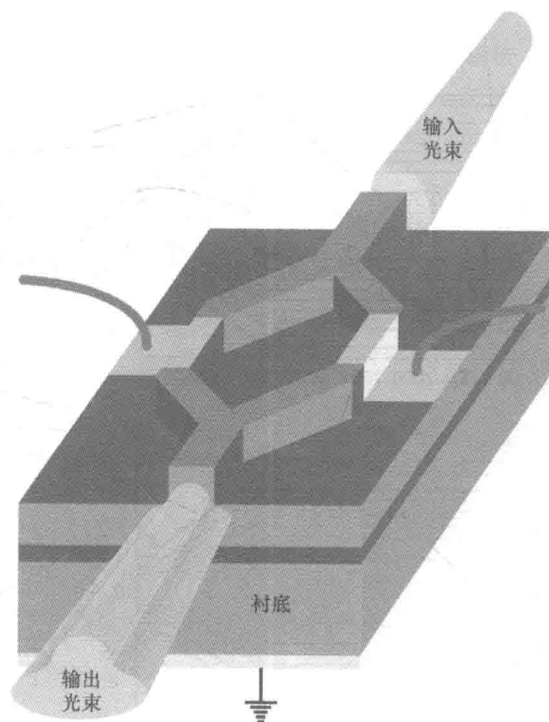


图4.25 Mach - Zehnder 干涉仪

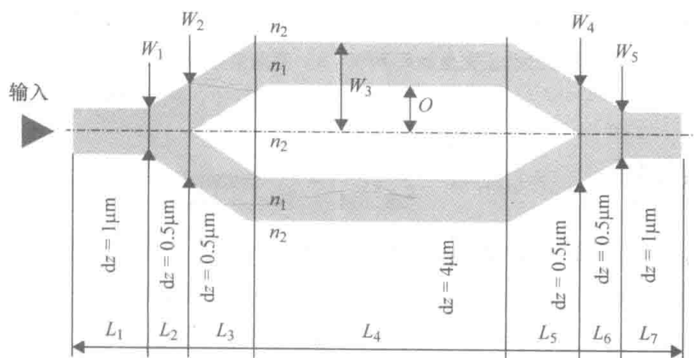


图4.26 Mach - Zehnder 干涉仪的尺寸和有限差分网格尺寸

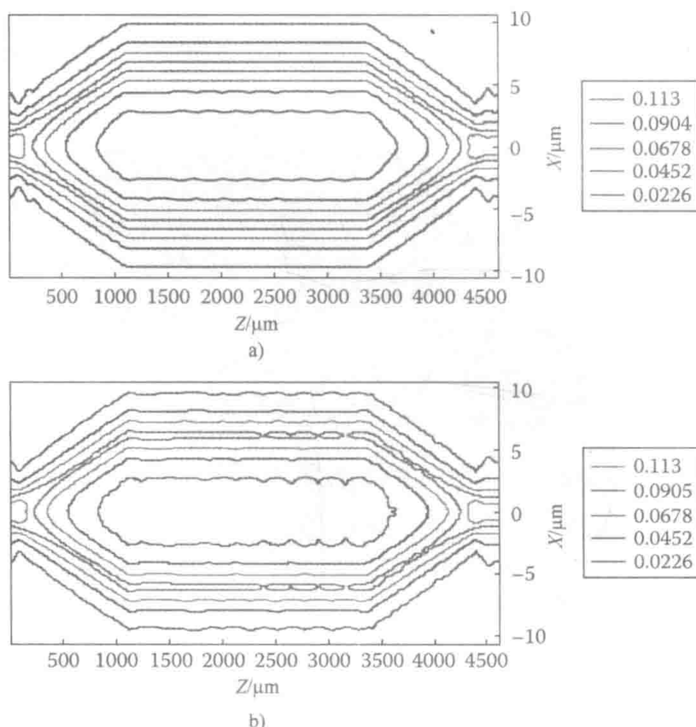


图 4.27　图 4.26 中的 Mach - Zehnder 干涉仪计算的场密度等值线（见本书封 3 彩图）
a）非正交坐标系 BPM　b）直角坐标系 BPM

4.6　时域分析

从“引论”开始到“BPM 应用实例”中讨论的标准 BPM 算法，适用于处理大计算域，因此大量应用于光子器件的设计和建模中。BPM 对单方向光的传播计算效率很高。如果考虑大量反射波，则 BPM 的效率会快速下降。这种情况，更适合于直接在频域[186]或时域求解波动方程。

时域法来源于射频领域计算电磁场分布。多种方法应用广泛，它们有有限差分时域法（FD - TDM）[4]，有限元时域法（FE - TDM）[187,188]，和传输线法（TLM）[192 - 194]。FE - TDM 和 FD - TDM 后来用于光子学[192 - 194]。FD - TDM 和 FE - TDM 的主要缺点是消耗计算的资源较大，所以计算时间相对较长。因此，研究者投入巨大精力改进时域法，以用于光子学。最初，出现的方法是本章和第 3 章中讨论过的标量法和半向量法[195,196]。随后，出现了本章讨论的 BPM，以提高时

域算法的效率。由此发展出时域光束传播法（TD－BPM），我们将在4.6.1节中讨论。另一种用于光子学，特别是用于激光器建模的时域法，是行波法（Travelling Wave Approach，TWA）。我们将在4.6.2节讨论TWA。

4.6.1 时域BPM

时域光束传播法（TD－BPM）适当选取波包函数，求解波动方程。所以，原理上，它和标准BPM法相同，算法上也是来自于标准BPM。为了解释其基本思路，让我们考虑电场向量的向量波动方程（参考文献［17］中的第9章），并代入$\vec{E}=\widehat{E}^*\exp(j\omega t)$。可以得到如下波包函数$\widehat{E}$的方程：

$$\nabla\times\nabla\times\widehat{E}=-\mu_0\varepsilon\left(\frac{\partial^2\widehat{E}}{\partial t^2}+2j\omega\frac{\partial\widehat{E}}{\partial t}-\omega^2\widehat{E}\right) \tag{4.40}$$

应用缓变波包近似（SVEA）：

$$\left|\frac{\partial^2\widehat{E}}{\partial t^2}\right|<<2\omega\left|\frac{\partial\widehat{E}}{\partial t}\right| \tag{4.41}$$

并重新整理各项，可得到如下方程：

$$-2j\omega\mu_0\varepsilon\frac{\partial\widehat{E}}{\partial t}=\nabla\times\nabla\times\widehat{E}+\omega^2\mu_0\varepsilon\widehat{E} \tag{4.42}$$

其本质上等价于用同轴近似求解方程（4.10）。所以，可以仿照同轴近似求解方程（4.10）的办法，用数值解法求解方程（4.42）。而还可以引入标量、极化，和低维有效折射率法按与推导方程（4.3）～方程（4.7）相同的步骤进行求解。例如，使用2D标量近似，则方程（4.42）可化简为

$$2j\omega\mu_0\varepsilon\frac{\partial\widehat{E}}{\partial t}=\frac{\partial^2\widehat{E}}{\partial x^2}\frac{\partial^2\widehat{E}}{\partial z^2}-\omega^2\mu_0\varepsilon\widehat{E} \tag{4.43}$$

方程（4.43）的解可以表示为

$$\widehat{E}=\exp\left[\frac{\Delta t}{2j\omega\mu_0\varepsilon}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\omega^2\mu_0\varepsilon\right)\right]\widehat{E} \tag{4.44}$$

实际执行TD－BPM时，广泛使用了FDM。例如Shibayama等人的文献[197,198]，Feng等人的文献[199]，Masoudi等人的文献[200,201]，Liu等人的文献[202]，和Maes等人的文献[203]中，执行TD－BPM时都使用了FDM和SVEA。FE－TDM算法的有限元形式可参考Fujisawa等人的文献[204]，Rodriguez－Esquerre等人的[205]和Obayya的文献[206]。还可以参照“BPM算法”一节讨论过的大角度BPM算法，在TD－BPM算法中引入宽带近似[207－209]。Yamauchi的文献[17]中给出了一个有关有限差分TD－BPM算法易于理解的高级研究。

4.6.2 行波法

行波法（TWA）的主要应用是激光器建模。在 TWA 中，引入波包函数，以消除对电磁波子波纵向采样的需要。该方法大幅度减少了对计算资源的需求，并减少了计算所需时间。我们下面对标量情况解释 TWA 的基本知识。我们将 $\hat{E} = \breve{E}^* \exp(-\mathrm{j}\beta z)$代入标量波动方程（4.43）中，可以得到如下 $\breve{E}$ 的方程：

$$2\mathrm{j}\omega\mu_0\varepsilon\frac{\partial\breve{E}}{\partial t} = \frac{\partial^2\breve{E}}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial^2\breve{E}}{\partial z^2} - 2\mathrm{j}\beta\frac{\partial\breve{E}}{\partial z} - \beta^2\breve{E}\right) - \omega^2\mu_0\varepsilon\breve{E} \tag{4.45}$$

在使用 SVEA，得：

$$\left|\frac{\partial^2\hat{E}}{\partial z^2}\right| \ll 2\beta\left|\frac{\partial\hat{E}}{\partial z}\right| \tag{4.46}$$

我们得到了 TWA 基础形式的方程：

$$2\mathrm{j}\omega\mu_0\varepsilon\frac{\partial\breve{E}}{\partial t} + 2\mathrm{j}\beta\frac{\partial\breve{E}}{\partial z} = \frac{\partial^2\breve{E}}{\partial x^2} - (\omega^2\mu_0\varepsilon + \beta^2)\breve{E} \tag{4.47}$$

对比 TD－BPM，方程（4.47）的解不能跟踪反射波。不过，当应用 TWA 研究腔内光子密度随时间演进时，可以通过引入对向后传播波的独立方程，避免这一问题[210,211]。方程（4.47）可以通过方程（4.47）在 $z-t$ 平面不连续的特性，引入有限差分高效求解[211,212]，也可以使用跳点法高效求解[210]。第 7 和第 8 章将讨论 TWA 在激光器建模上的应用。

参考文献

1. Ebeling, K.J., *Integrated Optoelectronics*. 1992, Berlin: Springer-Verlag.
2. Digonnet, M.J.F., *Rear-Earth-Doped Fibre Lasers and Amplifiers*. 2001, New York: Marcel Dekker.
3. Coldren, L.A. and S.W. Corzine, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*. Microwave and Optical Engineering, ed. K. Chang. 1995, New York: Wiley.
4. Taflove, A. and S.C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. 2005, London: Artech House.
5. Vassallo, C., Difficulty with vectorial BPM. *Electronics Letters*, 1997. 33(1): p. 61–62.
6. Clauberg, R. and P.v. Allmen, Vectorial beam propagation method for integrated optics. *Electronics Letters*, 1991. 27(8): p. 654–655.
7. Shintaku, T., Electromagnetic-field propagation based on Maxwell's propagation operator. *Optics Letters*, 1996. 21(21): p. 1727–1728.
8. Fogli, F., et al., Highly efficient full-vectorial 3-D BPM modeling of fibre to planar waveguide couplers. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(1): p. 136–143.
9. Moore, T.G., et al., Theory and application of radiation boundary operators. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1988. 36(12): p. 1797–1812.

10. Hayashi, K., et al., Combination of beam propagation method and mode expansion propagation method for bidirectional optical beam propagation analysis. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(11): p. 2040–2045.
11. Fleck, J.A., J.R. Morris, and M.D. Feit, Time-dependent propagation of high energy laser beams through the atmosphere. *Applied Physics*, 1976. 10: p. 129–160.
12. Feit, M.D. and J.A. Fleck, Light propagation in graded-index optical fibres. *Applied Optics*, 1978. 17(24): p. 3990–3998.
13. Yevick, D. and B. Hermansson, Efficient beam propagation techniques. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1990. 26(1): p. 109–112.
14. Yevick, D., C. Rolland, and B. Hermansson, Fresnel equation studies of longitudinally varying semiconductor rib waveguides: Reference wavevector dependence. *Electronics Letters*, 1989. 25(18): p. 1254–1256.
15. Feit, M.D. and J.A. Fleck, Simple spectral method for solving propagation problems in cylindrical geometry with fast Fourier transforms. *Optics Letters*, 1989. 14(13): p. 662–664.
16. Poladian, L. and F. Ladouceur, Unification of TE and TM beam propagation algorithms. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1998. 10(1): p. 105–107.
17. Yamauchi, J., *Propagating Beam Analysis of Optical Waveguides*. 2003. Research Studies Press.
18. Kriezis, E.E. and A.G. Papagiannakis, A joint finite-difference and FFT full vectorial beam propagation scheme. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(4): p. 692–700.
19. Liu, P.L., S.L. Yang, and D.M. Yuan, The semivectorial beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1993. 29(4): p. 1205–1211.
20. Mansour, I., A.D. Capobianco, and C. Rosa, Noniterative vectorial beam propagation method with a smoothing digital filter. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(5): p. 908–913.
21. Yamauchi, J., G. Takahashi, and H. Nakano, Full vectorial beam propagation method based on the McKee-Mitchell scheme with improved finite difference formulas. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(12): p. 2458–2464.
22. Hsueh, Y.L., M.C. Yang, and H.C. Chang, Tree dimensional noniterative full vectorial beam propagation method based on the alternating direction implicit method. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(11): p. 2389–2397.
23. Shibayama, J., et al., A three-dimensional horizontally wide-angle noniterative beam-propagation method based on the alternating-direction implicit scheme. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2006. 18(5–8): p. 661–663.
24. Chui, S.L. and Y.Y. Lu, Wide-angle full-vector beam propagation method based on an alternating direction implicit preconditioner. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2004. 21(3): p. 420–425.
25. Sharma, A. and A. Agrawal, New method for nonparaxial beam propagation. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2004. 21(6): p. 1082–1087.
26. Bhattacharya, D. and A. Sharma, Three-dimensional finite difference split-step nonparaxial beam propagation method: New method for splitting of operators. *Applied Optics*, 2009. 48(10): p. 1878–1885.
27. Clark, C.D., III and R.J. Thomas, Wide-angle split-step spectral method for 2D or 3D beam propagation. *Optical and Quantum Electronics*, 2009. 41(11–13): p. 849–857.
28. Hokr, B.H., et al., Higher-order wide-angle split-step spectral method for non-paraxial beam propagation. *Optics Express*, 2013. 21(13): p. 15815–15825.
29. Willems, J., J. Haes, and R. Baets. Eigenmode propagation analysis of radiation losses in waveguides with discontinuities and grating assisted couplers. In *Integrated Photonics Research*. 1993. Washington DC: OSA, p. 229–232.

30. Smartt, C.J., T.M. Benson, and P.C. Kendall. Exact operator method for the analysis of dielectric waveguides with application to integrated optics devices and laser facets. In *IET Second International Conference on Computation in Electromagnetics*. 1995, 335–338.
31. Smartt, C.J., T.M. Benson, and P.C. Kendall, Free space radiation mode method for the analysis of propagation in optical waveguide devices. *IEE Proceedings J*, 1993. 140(1): p. 56–61.
32. Gerdes, J., S. Helfert, and R. Pregla, Three-dimensional vectorial eigenmode algorithm for nonparaxial propagation in reflecting optical waveguide structures. *Electronics Letters*, 1995. 31(1): p. 65–66.
33. Bertolotti, M., P. Masciulli, and C. Sibilia, MoL numerical analysis of nonlinear planar waveguide. *Journal of Lightwave Technology*, 1994. 12(5): p. 784–789.
34. Mustieles, F.J., E. Ballesteros, and F. Hernandez-Gil, Multimodal analysis method for the design of passive TE/TM converters in integrated waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1993. 5(7): p. 809–811.
35. Lee, P.C., D. Schultz, and E. Voges, Tree-dimensional finite difference beam propagation algorithms for photonic devices. *Journal of Lightwave Technology*, 1992. 10(12): p. 1832–1838.
36. Ahlers, E. and R. Pregla, 3-D modelling of concatenations of straight and curved waveguides by MoL-BPM. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29: p. 151–156.
37. Kawano, K., et al., Bidirectional finite-element method-of-line beam propagation method (FE-MOL-BPM) analysing optical waveguides with discontinuities. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1998. 10(2): p. 244–245.
38. Gerdes, J., Bidirectional eigenmode propagation analysis of optical waveguides based on method of lines. *Electronics Letters*, 1994. 30(7): p. 550–551.
39. Ratowsky, R.P. and J.A. Fleck, Accurate numerical-solution of the Helmholtz-equation by iterative Lanczos reduction. *Optics Letters*, 1991. 16(11): p. 787–789.
40. Ratowsky, R.P., J.A. Fleck, and M.D. Feit, Accurate solution of the Helmholtz-equation by Lanczos orthogonalization for media with loss or gain. *Optics Letters*, 1992. 17(1): p. 10–12.
41. Ratowsky, R.P., J.A. Fleck, and M.D. Feit, Accurate description of ultrawide-angle beam-propagation in homogeneous media by Lanczos orthogonalization. *Optics Letters*, 1994. 19(17): p. 1284–1286.
42. Hermansson, B., et al., A comparison of Lanczos electric-field propagation methods. *Journal of Lightwave Technology*, 1992. 10(6): p. 772–776.
43. Luo, Q. and C.T. Law, Nonparaxial propagation of a cylindrical beam with Lanczos reduction. *Optics Letters*, 2000. 25(12): p. 869–871.
44. Bienstman, P. and R. Baets, Advanced boundary conditions for eigenmode expansion models. *Optical and Quantum Electronics*, 2002. 34: p. 523–540.
45. Chew, W.C., J.M. Jin, and E. Michielssen, Complex coordinate stretching as a generalised absorbing boundary condition. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1997. 15(6): p. 363–369.
46. Ortega-Monux, A., I. Molina-Fernandez, and J.G. Wanguemert-Perez, 3D-Scalar Fourier Eigenvector Expansion Method (Fourier-EEM) for analyzing optical waveguide discontinuities. *Optical and Quantum Electronics*, 2005. 37(1–3): p. 213–228.
47. Ctyroky, J., A simple bi-directional mode expansion propagation algorithm based on modes of a parallel-plate waveguide. *Optical and Quantum Electronics*, 2006. 38(1–3): p. 45–62.
48. Mo, G.-L. and X.-C. Zhang, High accuracy modal analysis and beam propagation method for nano-waveguides. *Optical and Quantum Electronics*, 2012. 44(10–11): p. 459–470.
49. Ctyroky, J., Improved bidirectional-mode expansion propagation algorithm based on fourier series. *Journal of Lightwave Technology*, 2007. 25(9): p. 2321–2330.
50. Ctyroky, J., 3-D bidirectional propagation algorithm based on Fourier series. *Journal of Lightwave Technology*, 2012. 30(23): p. 3699–3708.

51. Helfert, S. and R. Pregla. Modelling of taper structures in cylindrical coordinates. In *Integrated Photonics Research*. 1995. Dana Point, California USA: OSA, p. 30–32.
52. Ahlers, E. and R. Pregla. New vector BPM in cylindrical coordinates based on method of lines. In *Integrated Photonics Research*. 1995. Dana Point, California, USA: OSA, 24–26.
53. Pregla, R. and E. Ahlers, Method of lines for analysis of arbitrarily curved waveguide bends. *Electronics Letters*, 1994. 30(18): p. 1478–1479.
54. Gu, J.S., P.A. Besse, and H. Melchior, Method of lines for the analysis of propagation characteristics of curved optical rib waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(3): p. 531–537.
55. Bienstman, P., Two-stage mode finder for waveguides with 2D cross-section. *Optical and Quantum Electronics*, 2004. 36: p. 5–14.
56. Lopez-Dona, J.M., J.G. Wanguemert-Perez, and I. Molina-Fernandez, Fast-Fourier-based three-dimensional full-vectorial beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2005. 17(11): p. 2319–2321.
57. Vassallo, C., Improvement of finite difference methods for step-index optical waveguides. *IEE Proceeding J*, 1992. 139(2): p. 137–142.
58. Yamauchi, J., et al., Modified finite difference formula for the analysis of semivectorial modes in step index optical waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1997. 9(7): p. 961–963.
59. Y.P. Chiou, Y.C. Chiang, and H.C. Chang, Improved three point formulas considering the interface conditions in the finite difference analysis of step index optical devices. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(2): p. 243–251.
60. Stoffer, R. and H.J.W.M. Hoekstra, Efficient interface conditions based on a 5-point finite difference operator. *Optical and Quantum Electronics*, 1998. 30: p. 375–383.
61. Yamauchi, J., et al., Transverse-magnetic BPM analysis of a step-index slab waveguide expressed by a sigmoid Function. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2009. 21(1–4): p. 149–151.
62. Chiou, Y.P. and H.C. Chang, Efficient beam propagation method based on Pade approximants in the propagation direction. *Optics Letters*, 1997. 22(13): p. 949–951.
63. Chung, Y. and N. Dagli, An assessment of finite difference beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1990. 26(8): p. 1335–1339.
64. Splett, A., M. Majd, and K. Petermann, A novel beam propagation method for large refractive index steps and large propagation distances. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1991. 3(5): p. 466–468.
65. Hadley, G.R., Wide angle beam propagation using Pade approximant operators. *Optics Letters*, 1992. 17(20): p. 1426–1428.
66. Hadley, G.R., Multistep method for wide angle beam propagation. *Optics Letters*, 1992. 17(24): p. 1743–1745.
67. Anada, T., et al., Very-wide-angle beam propagation methods for integrated optical circuits. *IEICE Transactions on Electronics*, 1999. E82-C(7): p. 1154–1158.
68. van Stralen, M.J.N., H. Blok, and M.V. de Hoop, Design of sparse matrix representations for the propagator used in the BPM and directional wave field decomposition. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29(2): p. 179–197.
69. Schultz, D., C. Glingener, and E. Voges, Novel generalised finite difference beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1994. 30(4): p. 1132–1140.
70. Huang, W.P. and C.L. Xu, Simulation of three dimensional optical waveguides by full vector beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1993. 29(10): p. 2693–2649.
71. Huang, W.P., C.L. Xu, and S.K. Chaudhuri, A vector beam propagation method based on H fields. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1991. 3(12): p. 1117–1120.
72. Yamauchi, J., et al., Improved multistep method for wide angle beam propagation. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1996. 8(10): p. 1361–1363.

73. Shibayama, J., et al., Efficient nonuniform schemes for paraxial and wide-angle finite difference beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(4): p. 677–683.
74. Shibayama, J., et al., A three-dimensional multistep horizontally wide-angle beam-propagation method based on the generalized Douglas scheme. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2006. 18(21–24): p. 2535–2537.
75. He, Y.Z. and F.G. Shi, Improved full-vectorial beam propagation method with high accuracy for arbitrary optical waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2003. 15(10): p. 1381–1383.
76. Le, K.Q., et al., The complex Jacobi iterative method for three-dimensional wide-angle beam propagation. *Optics Express*, 2008. 16(21): p. 17021–17030.
77. Chung, Y. and N. Dagli, Analysis of z-variant semiconductor rib waveguides by explicit finite difference beam propagation method with nonuniform mesh configuration. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(10): p. 2296–2305.
78. Chung, Y. and N. Dagli, Explicit finite difference beam propagation method: Application to semiconductor rib waveguide Y-junction analysis. *Electronics Letters*, 1990. 26(11): p. 711–713.
79. Xiang, F. and G.L. Yip, An explicit and stable finite difference 2-D vector beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1994. 6(10): p. 1248–1250.
80. Masoudi, H.M., Spurious modes in the DuFort-Frankel finite-difference beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1997. 9(10): p. 1382–1384.
81. Sewell, P., T.M. Benson, and A. Vukovic, A stable DuFort-Frankel beam propagation method for lossy structures and those with perfectly matched layers. *Journal of Lightwave Technology*, 2005. 23(1): p. 374–381.
82. Yioultsis, T.V., G.D. Ziogos, and E.E. Kriezis, Explicit finite-difference vector beam propagation method based on the iterated Crank-Nicolson scheme. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2009. 26(10): p. 2183–2191.
83. Lee, C.T., M.L. Wu, and J.M. Hsu, Novel beam propagation algorithms for tapered optical structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(11): p. 2379–2388.
84. Sewell, P., et al., Tapered beam propagation. *Electronics Letters*, 1996. 32(11): p. 1025–1026.
85. Sewell, P., et al., Bi-oblique propagation analysis of symmetric and asymmetric Y-junctions. *Journal of Lightwave Technology*, 1997. 15(4): p. 688–696.
86. Yamauchi, J., J. Shibayama, and H. Nakano, Finite difference beam propagation method using the oblique coordinate system. *Electronics and Communications in Japan, Part 2*, 1995. 78(6): p. 20–27.
87. Sujecki, S., et al., Novel beam propagation algorithms for tapered optical structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(11): p. 2379–2388.
88. Benson, T.M., et al., Structure related beam propagation. *Optical and Quantum Electronics*, 1999. 31: p. 689–703.
89. Rivera, M., A finite difference BPM analysis of dielectric waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(2): p. 233–238.
90. Deng, H., et al., Investigations of 3-D semivectorial finite difference beam propagation method for bent waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(5): p. 915–922.
91. Yamauchi, J., et al., Finite difference beam propagation method for circularly symmetric fields. *IEICE Transactions on Electronics*, 1992. E75-C(9): p. 1093–1095.
92. Montanari, E., et al., Finite element full vectorial propagation analysis for three dimensional z varying optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(4): p. 703–714.
93. Schultz, D., et al., Mixed finite element beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(7): p. 1336–1342.

94. Obaya, S.S.A., B.M.A. Rahman, and H.A. El-Mikati, New full vectorial numerically efficient propagation algorithm based on the finite element method. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(3): p. 409–415.
95. Tsuji, Y., M. Koshiba, and N. Takimoto, Finite element beam propagation method for anisotropic optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(4): p. 723–728.
96. Silva, J.P.d., H.E. Hernandez-Figueora, and A.M.F. Frasson, Improved vectorial finite element BPM analysis for transverse anisotropic media. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(2): p. 567–576.
97. Saitoh, K. and M. Koshiba, Approximate scalar finite element beam propagation method with perfectly matched layers for anisotropic optical waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2001. 19(5): p. 786–792.
98. Vanbrabant, P.J.M., et al., A finite element beam propagation method for simulation of liquid crystal devices. *Optics Express*, 2009. 17(13): p. 10895–10909.
99. Schmidt, F., An adaptive approach to the numerical solution of Fresnel's wave equation. *Journal of Lightwave Technology*, 1993. 11(9): p. 1425–1434.
100. Deng, H. and D. Yevick, The nonunitarity of finite-element beam propagation algorithms. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2005. 17(7): p. 1429–1431.
101. Kaczmarski, P. and P.E. Lagasse, Bidirectional beam propagation method. *Electronics Letters*, 1988. 24(11): p. 675–676.
102. Jin, G.H., et al., Improved bidirectional beam propagation method for analysis of reflection on nonparallel interfaces. *Electronics Letters*, 1995. 31(21): p. 1867–1868.
103. Liu, Q.H. and W.C. Chew, Analysis of discontinuities in planar dielectric waveguides: An eigenmode propagation method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1991. 39(3): p. 422–429.
104. Sztefka, G. and H.P. Nolting, Bidirectional eigenmode propagation for large refractive index steps. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1993. 5(5): p. 554–557.
105. Bresler, A.D., G.H. Joshi, and N. Marcuvitz, Orthogonality properties for modes in passive and active uniform wave guides. *Journal of Applied Physics*, 1958. 29(5): p. 794–798.
106. Reed, M., et al., Limitations of one dimentional models of waveguide facets. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1997. 15(4): p. 196–198.
107. Vukovic, A., et al., Advances in facet design for buried lasers and amplifiers. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2000. 6(1): p. 175–184.
108. Vukovic, A., et al., Novel hybrid method for efficient 3-D fibre to chip coupling analysis. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2002. 8(6): p. 1285–1292.
109. Yu, C. and D. Yevick, Application of bidirectional parabolic equation method to optical facets. *Journal of Optical Society of America A*, 1997. 14(7): p. 1448–1450.
110. Wei, S.H. and Y.Y. Lu, Application of BiCGSTAB to waveguide discontinuity problems. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2002. 14(5): p. 645–647.
111. Chiou, Y.P. and H.C. Chang, Analysis of optical waveguide discontinuities using the Pade approximants. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1997. 9(7): p. 964–966.
112. Helfert, S.F. and R. Pregla, Determining reflections for beam propagation algorithms. *Optical and Quantum Electronics*, 2001. 33: p. 343–358.
113. El-Refaei, H., I. Betty, and D. Yevick, The application of complex Pade approximants to reflection at optical waveguide facets. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2000. 12(2): p. 158–160.
114. Petruskevicius, R., BiBPM modeling of slow wave structures. *Optical and Quantum Electronics*, 2007. 39(4–6): p. 407–418.
115. Romanova, E.A. and S.B. Gaal, Modeling of light propagation through step-like discontinuities in slab dielectric waveguides. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2004. 41(2): p. 108–114.

116. Yoneta, S., M. Koshiba, and Y. Tsuji, Combination of beam propagation method and finite element method for optical beam propagation analysis. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17(11): p. 2398–2404.
117. Rao, H., R. Scarmozzino, and R.M. Osgood, A bidirectional beam propagation method for multiple dielectric interfaces.
118. Liu, Q. and W.C. Chew, Analysis of discontinuities in planar dielectric wave-guides - an eigenmode propagation method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1991. 39(3): p. 422–430.
119. Lu, Y.Y. and S.H. Wei, A new iterative bidirectional beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2002. 14(11): p. 1533–1535.
120. Ho, P.L. and Y.Y. Lu, A stable bidirectional propagation method based on scattering operators. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2001. 13(12): p. 1316–1318.
121. Helfert, S.F. and R. Pregla, Efficient analysis of periodic structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(9): p. 1694–1702.
122. Helfert, S.F., Numerical stable determination of Floquet-modes and the application to the computation of band structures. *Optical and Quantum Electronics*, 2004. 36(1–3): p. 87–107.
123. Helfert, S.F., Determination of Floquet modes in asymmetric periodic structures. *Optical and Quantum Electronics*, 2005. 37(1–3): p. 185–197.
124. Poon, T.-C. and T. Kim, *Engineering Optics with MATLAB*. 2006, London: World Scientific Publishing.
125. Wartak, M.S., *Computational Photonics: An Introduction with MATLAB*. 2013, Cambridge: Cambridge University Press.
126. Smith, G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Method*. 1988, Oxford: Oxford University Press.
127. Hadley, G.R., Transparent boundary condition for the beam propagation method. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1992. 28(1): p. 363–370.
128. Song, G.H., Transparent boundary conditions for beam-propagation analysis from the Green's function method. *Journal of Optical Society of America A*, 1993. 10(5): p. 896–904.
129. Vassallo, C. and F. Collino, Highly efficient absorbing boundary condition for beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(6): p. 1570–1577.
130. Vassallo, C. and J.M. van-der-Keur, Highly efficient transparent boundary conditions for finite difference beam propagation method at order four. *Journal of Lightwave Technology*, 1997. 15(10): p. 1958–1965.
131. Yevick, D., J. Yu, and Y. Yayon, Optimal absorbing boundary conditions. *Journal of Optical Society of America A*, 1995. 12(1): p. 107–110.
132. Berenger, J., A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, 1994. 114(2): p. 185–200.
133. Huang, W.P., et al., The perfectly matched layer (PML) boundary condition for the beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1996. 8(5): p. 649–651.
134. Vassallo, C. and F. Collino, Highly efficient absorbing boundary conditions for the beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(6): p. 1570–1577.
135. Yevick, D., J. Yu, and F. Schmidt, Analytic studies of absorbing and impedance-matched boundary layers. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1997. 9(1): p. 73–75.
136. Bamberger, A., et al., Higher-order paraxial wave-equation approximations in heterogeneous media. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 1988. 48(1): p. 129–154.
137. Helfert, S.F. and R. Pregla, A finite difference beam propagation algorithm based on generalized transmission line equations. *Optical and Quantum Electronics*, 2000. 32 (6–8): p. 681–690.
138. Sewell, P., et al., The dispersion characteristics of oblique coordinate beam propagation algorithms. *Journal of Lightwave Technology*, 1999. 17: p. 514–518.

139. Sujecki, S., et al., Nonlinear properties of tapered laser cavities. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2003. 9(3): p. 823–834.
140. Spiegel, M.R., *Calculus of Finite Differences and Difference Equations*. 1994: McGraw-Hill, Inc.
141. Sujecki, S., Generalized rectangular finite difference beam propagation method. *Applied Optics*, 2008. 47(23): p. 4280–4286.
142. Rao, H., et al., Complex propagators for evanescent waves in bidirectional beam propagation method. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(8): p. 1155–1160.
143. Collins, M.D., Higher-order pade approximations for accurate and stable elastic parabolic equations with application to interface wave-propagation. *Journal of the Acoustical Society of America*, 1991. 89(3): p. 1050–1057.
144. Collins, M.D., A 2-way parabolic equation for elastic media. *Journal of the Acoustical Society of America*, 1993. 93(4): p. 1815–1825.
145. Milinazzo, F.A., C.A. Zala, and G.H. Brooke, Rational square-root approximations for parabolic equation algorithms. *Journal of the Acoustical Society of America*, 1997. 101(2): p. 760–766.
146. Lingevitch, J.F. and M.D. Collins, Wave propagation in range-dependent poro-acoustic waveguides. *Journal of the Acoustical Society of America*, 1998. 104(2): p. 783–790.
147. Yevick, D. and D.J. Thomson, Complex Pade approximants for wide-angle acoustic propagators. *Journal of the Acoustical Society of America*, 2000. 108(6): p. 2784–2790.
148. Lu, Y.Y., A complex coefficient rational approximation of root 1+x. *Applied Numerical Mathematics*, 1998. 27(2): p. 141–154.
149. Lu, Y.Y. and P.L. Ho, Beam propagation method using a (p-1)/p Pade approximant of the propagator. *Optics Letters*, 2002. 27(9): p. 683–685.
150. Chui, S.L. and Y.Y. Lu, A propagator-theta beam propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2004. 16(3): p. 822–824.
151. Vassallo, C., Limitations of the wide-angle beam propagation method in nonuniform systems. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 1996. 13(4): p. 761–770.
152. Jablonski, T.F., Complex-modes in open lossless dielectric wave-guides. *Journal of the Optical Society of America A-Optics Image Science and Vision*, 1994. 11(4): p. 1272–1282.
153. Chiang, Y.C., Y.P. Chiou, and H.C. Chang, Improved full-vectorial finite-difference mode solver for optical waveguides with step-index profiles. *Journal of Lightwave Technology*, 2002. 20(8): p. 1609–1618.
154. Chiou, Y.P., Y.C. Chiang, and H.C. Chang, Improved three-point formulas considering the interface conditions in the finite-difference analysis of step-index optical devices. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(2): p. 243–251.
155. Yevick, D., The application of complex Pade approximants to vector field propagation. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2000. 12(12): p. 1636–1638.
156. Xie, H., W. Lu, and Y.Y. Lu, Complex modes and instability of full-vectorial beam propagation methods. *Optics Letters*, 2011. 36(13): p. 2474–2476.
157. Nito, Y., et al., A beam-propagation method using both electric and magnetic fields. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2011. 23(7): p. 429–431.
158. Yevick, D., W. Bardyszewski, and M. Glasner, Stability issues in vector electric field propagation. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1995. 7(6): p. 658–660.
159. Vassallo, C., Wide-angle bpm and power conservation. *Electronics Letters*, 1995. 31(2): p. 130–131.
160. Helfert, S. and R. Pregla, Finite difference expressions for arbitrarily positioned dielectric steps in waveguide structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(10): p. 2414–2421.

161. Lee, C.T., M.L. Wu, and J.M. Hsu, Beam propagation analysis for tapered waveguides: Taking account of the curved phase-front effect in paraxial approximation. *Journal of Lightwave Technology*, 1997. 15(11): p. 2183–2189.
162. Hadley, G.R., Corrections to "Slanted-wall beam propagation." *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(17): p. 3959–3960.
163. Ma, C. and E. Van Keuren, A three-dimensional wide-angle BPM for optical waveguide structures. *Optics Express*, 2007. 15(2): p. 402–407.
164. Sujecki, S., Optimised tapered beam propagation. *Optoelectronics Review*, 2000. 8(3): p. 269–274.
165. Sujecki, S., New beam propagation algorithm for optical tapers. *International Journal of Electronics and Communications (AEU)*, 2001. 55(3): p. 185–190.
166. Sewell, P., et al., Non standard beam propagation. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1996. 13: p. 24–26.
167. Sujecki, S., Wide-angle, finite-difference beam propagation in oblique coordinate system. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2008. 25(1): p. 138–145.
168. Sewell, P., T.M. Benson, and P.C. Kendall, Sectorial coordinates for curved optical waveguides. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1997. 14(4): p. 202–204.
169. Cada, M., F. Xiang, and L.B. Felsen, Intrinsic modes in tapered optical waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999. 24(5): p. 758–765.
170. Ebelling, K.J., *Integrated Optoelectronics: Waveguide Optics, Photonics, Semiconductors*. 1993, Berlin: Springer Verlag.
171. Kitoh, T., et al., Bending loss reduction in silica-based waveguides by using lateral offsets. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(4): p. 555–562.
172. Lui, W.W., et al., Polarisation rotation in semiconductor bending waveguides: A coupled-mode theory formulation. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(5): p. 929–936.
173. Kim, C.M., Y.M. Kim, and W.K. Kim, Leaky modes of circular slab waveguides: Modified Airy functions. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2002. 8(6): p. 1239–1245.
174. Kim, S. and A. Gopinath, Vector analysis of optical dielectric waveguide bends using finite-difference method. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(9): p. 2085–2092.
175. Sewell, P. and T.M. Benson, Efficient curvature analysis of buried waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(9): p. 1321–1329.
176. Lu, Y.Y. and P.L. Ho, Beam propagation modelling of arbitrarily bent waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2002. 14(12): p. 1698–1700.
177. Rivera, M., A finite difference BPM analysis of bent dielectric waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(2): p. 233–238.
178. Lui, W.W., et al., Full-vectorial wave propagation in semiconductor optical bending waveguides and equivalent straight waveguide approximations. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(5): p. 910–914.
179. Scrifes, D.R., W. Streifer, and R.D. Burnham, Curved stripe GaAs: GaAlAs diode lasers and waveguides. *Applied Physics Letters*, 1978. 32(4): p. 231–234.
180. Nolting, H.P. and R. Maerz, Results of benchmark tests for different numerical BPM algorithms. *Journal of Lightwave Technology*, 1995. 13(2): p. 216–224.
181. Huang, W.P. and B.E. Little, Power exchange in tapered optical couplers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27: p. 1932–1938.
182. Cascio, L., T. Rozzi, and L. Zappelli, Radiation loss of Y-junctions in rib waveguide. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 1995. 43: p. 1788–1797.
183. Yajima, H., Coupled mode analysis of dielectric planar branching waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1978. 14: p. 749–755.
184. Burns, W.K. and A.F. Milton, An analytic solution in optical waveguide branches. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1980. 16: p. 446–454.

185. Kuznetsov, M., Radiation loss in dielectric waveguide y branch structures. *Journal of Lightwave Technology*, 1985. 3: p. 674–677.
186. Yang, W. and A. Gopinath, A boundary integral method for propagation problems in integrated optical structures. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1995. 7(7): p. 777–779.
187. He, Q., H. Gan, and D. Jiao, Explicit time-domain finite-element method stabilized for an arbitrarily large time step. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2012. 60(11): p. 5240–5250.
188. Teixeira, F.L., Time-domain finite-difference and finite-element methods for Maxwell equations in complex media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 2008. 56(8): p. 2150–2166.
189. Christopoulos, C., *The Transmission-Line Modeling Method: TLM*. 1995, New Jersey: IEEE Press.
190. Chan, Y.C., M. Premaratne, and A.J. Lowery, Semiconductor laser line width from the transmission-line laser model. *IEE Proceedings-Optoelectronics*, 1997. 144(4): p. 246–252.
191. Janyani, V., et al., TLM modelling of nonlinear optical effects in fibre Bragg gratings. *IEE Proceedings-Optoelectronics*, 2004. 151(4): p. 185–192.
192. Joseph, R.M. and A. Taflove, Spatial solution deflection mechanism indicated by FD-TD Maxwells equations modeling. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1994. 6(10): p. 1251–1254.
193. Liang, T. and R.W. Ziolkowski, Mode conversion of ultrafast pulses by grating structures in layered dielectric waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 1997. 15(10): p. 1966–1973.
194. Rodriguez-Esquerre, V.F., M. Koshiba, and H.E. Hernandez-Figueroa, Finite-element time-domain analysis of 2-D photonic crystal resonant cavities. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2004. 16(3): p. 816–818.
195. Huang, W.P., et al., A scalar finite-difference time-domain approach to guided-wave optics. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1991. 3(6): p. 524–526.
196. Huang, W.P., S.T. Chu, and S.K. Chaudhuri, A semivectorial finite-difference time-domain method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1991. 3(9): p. 803–806.
197. Shibayama, J., et al., A finite-difference time-domain beam-propagation method for TE- and TM-wave analyses. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(7): p. 1709–1715.
198. Shibayama, J., et al., Efficient time-domain finite-difference beam propagation methods for the analysis of slab and circularly symmetric waveguides. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(3): p. 437–442.
199. Feng, N.N., G.R. Zhou, and W.P. Huang, An efficient split-step time-domain beam-propagation method for modeling of optical waveguide devices. *Journal of Lightwave Technology*, 2005. 23(6): p. 2186–2191.
200. Masoudi, H.M. and M.S. Akond, Efficient iterative time-domain beam propagation methods for ultra short pulse propagation: Analysis and assessment. *Journal of Lightwave Technology*, 2011. 29(16): p. 2475–2481.
201. Masoudi, H.M., M.A. Al-Sunaidi, and J.M. Arnold, Efficient time-domain beam-propagation method for modeling integrated optical devices. *Journal of Lightwave Technology*, 2001. 19(5): p. 759–771.
202. Liu, P.L., Q. Zhao, and F.S. Choa, Slow-wave finite-difference beam-propagation method. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1995. 7(8): p. 890–892.
203. Maes, B., et al., Modeling comparison of second-harmonic generation in high-index-contrast devices. *Optical and Quantum Electronics*, 2008. 40(1): p. 13–22.
204. Fujisawa, T. and M. Koshiba, Time-domain beam propagation method for nonlinear optical propagation analysis and its application to photonic crystal circuits. *Journal of Lightwave Technology*, 2004. 22(2): p. 684–691.

205. Rodriguez-Esquerre, V.F. and H.E. Hernandez-Figueroa, Novel time-domain step-by-step scheme for integrated optical applications. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2001. 13(4): p. 311–313.
206. Obayya, S.S.A., Efficient finite-element-based time-domain beam propagation analysis of optical integrated circuits. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2004. 40(5): p. 591–595.
207. Lim, J.J., et al., Wideband finite-difference-time-domain beam propagation method. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2002. 34(4): p. 243–247.
208. Le, K.Q., T. Benson, and P. Bienstman, Application of modified Pade approximant operators to time-domain beam propagation methods. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2009. 26(12): p. 2285–2289.
209. Masoudi, H.M., A novel nonparaxial time-domain beam-propagation method for modeling ultrashort pulses in optical structures. *Journal of Lightwave Technology*, 2007. 25(10): p. 3175–3184.
210. Gehrig, E., O. Hess, and R. Wallenstein, Modeling of the performance of high-power diode amplifier systems with an optothermal microscopic spatio-temporal theory. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999. 35(3): p. 320–331.
211. Egan, A., et al., Dynamic instabilities in master oscillator power amplifier semiconductor lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1998. 34(1): p. 166–170.
212. Chan, R.Y. and J.M. Liu, Time-domain wave-propagation in optical structures. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1994. 6(8): p. 1001–1003.

第5章 光子器件的热力学建模

光子器件发光的物理过程一般会伴随着发热，造成器件工作温度升高。工作温度不受控制地增高，会造成光功率的下降、改变输出光波的参数，或造成器件永久损坏。因而，光子器件的热管理对器件性能优化非常重要。

光子器件的热模型可以预测器件的温度分布。当知道器件内的温度分布后，就可以确定热量从发热源开始扩散的路径。因此，热模型可以辅助器件封装设计，从而将器件内产生的热量有效地排出。所以，热模型在光子器件设计流程中扮演着重要的作用。我们考虑两个有代表性的例子，一个是激光器二极管，一个是光纤激光器。因为热传输和耗散涉及众多其他工程领域的知识，可参考参考文献［1］。在本章中，我们将着重于将其他工程领域发展起来的理论，引入到光子学器件设计和建模中。所以，我们只对基础理论中对理解材料的重点内容，以及对光子器件设计格外重要的部分进行复述。

我们首先对热流理论进行一个简单的描述，然后将此理论应用于光子器件的发热和散热分析。然后，在5.3节和5.4节中，我们将讨论有限差分法（Finite Difference Method，FDM）分别在计算均匀和非均匀介质内温度分布中的应用。在5.5节，我们将对光子器件热建模的一些特殊方面进行简短的讨论，其中包括边界热阻、边界条件和奇异性。

我们注意到光子器件热建模与实验分析有很强的关联性。热照相机可以拍出器件内低空间分辨率的热分布图像。更先进的技术，如热反射和微拉曼光谱仪可以得到空间分辨率更好的热分布图像。激光器结温可以由各种技术测得。所以我们不在本章讨论这个问题。相关信息读者可参考参考文献［2，3］。

5.1 热流

让我们考虑一组热源。如果我们将所有热源组成一个球，则可以写出球形外的热通量、球内部的发热率和球内能量的变化率之间的方程。由能量守恒定律，球外增加的总能量，在单位时间间隔内，需要等于从球内由各种热传递途径流出球内的能量（见图5.1）。如球的体积为 V，其表面积为 S，则由能量守恒，应由下面的式子：

$$\iiint_V \frac{\partial E}{\partial t}\mathrm{d}V = \iiint_V Q\mathrm{d}V - \oint_S \vec{q}\mathrm{d}S \tag{5.1}$$

式中，E 为能量密度（单位为［$\mathrm{J/m^3}$］）；Q 为发热率分布（单位［$\mathrm{J/(sm^3)}$］）；$\vec{q}$

为热通量（单位 [W/m^2]）（注意热通量向量指向球外对应了流出的热通量，它的方向与球面的单位外矢量方向相同）。

由散度理论，式（5.1）可以改写成：

$$\frac{\partial E}{\partial t} = Q - \nabla \vec{q} \tag{5.2}$$

热流和能量密度都与温度有关：

$$E = cT \tag{5.3a}$$

$$\vec{q} = -\rho \nabla T \tag{5.3b}$$

式中，c 为单位热容，单位是 J/K·m^3；ρ 为热传导率，单位是 W/m·K。将式（5.3）代入式（5.2）可得最后的方程：

$$c\frac{\partial T}{\partial t} = Q + \nabla(\rho \nabla T) \tag{5.4}$$

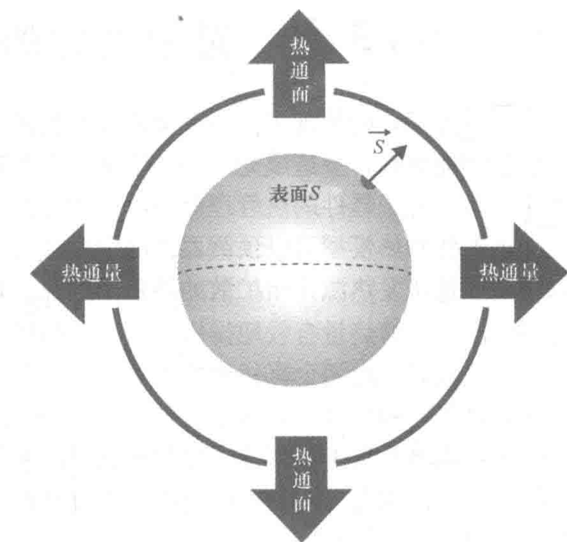


图 5.1 流出球体的热流过程示意图

方程（5.4）的求解，是在计算域内已知热源分布和边界条件下，求温度分布的过程。如果计算域是均匀介质，方程（5.4）可以化简为

$$\frac{c}{\rho}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{Q}{\rho} + \Delta T \tag{5.5}$$

稳态下，方程（5.5）可以化简为泊松方程，如果热源不在计算域内，它还可以进一步化简为拉普拉斯方程。泊松方程和（特别是）拉普拉斯方程在大多数情况下有解析解[4,5]。而且，在热传导相关的标准教科书上都可找到方程（5.5）的数值解法，以及拉普拉斯和泊松方程的完备的数值解法[1]。一些情况下，可以用方程（5.5）代替方程（5.4），研究光子器件内的热流。不过，一般研究光子器件内的热流时，因为介质并不是均匀的，所以一般需要求解方程（5.4）而不是方程（5.5）。特别是对激光器二极管，热流流经若干半导体层，而它们的热性质各异。除了若干简单的例子之外，计算光子器件内的热分布，都需要高级数值解法。我们将在下一节详细讨论这一课题。而在进入下一节之前，我们先引入热阻的概念，其对我们研究光子器件内的热流很有帮助。热阻的推导过程也是方程（5.1）的一个应用实例，有助于理解“光子器件内的热流”一节。

我们考虑一个棒，它的横截面表面积为 S，长度为 L（见图 5.2）。

流过这个棒的热通量的总功率等于 ρ。假设横截面上的热通量均匀分布。假设棒的四壁绝热，所以热值沿着 y 轴方向流动。所以，由方程（5.3b），我们可以得

到热流向量的 y 分量：

$$q_y = -\rho \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}y} \tag{5.6}$$

我们对方程（5.6）两侧对横截面积 S 求积分：

$$\iint_S q_y \mathrm{d}S = -\rho \iint_S \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}y}\mathrm{d}S$$

式中，注意$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}y}$（$x$，$z$）= 常数，故

$$P = -\rho \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}y}S$$

在对棒的长度求积分：

$$\int_0^L P\mathrm{d}y = -\rho S\int_0^L \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}y}\mathrm{d}y$$

最后得到

$$PL = -\rho S[T(y=L) - T(y=0)] \tag{5.7}$$

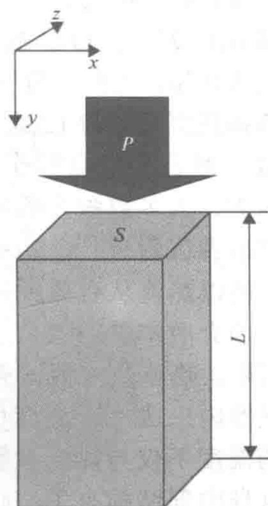


图 5.2　流过一个棒的热流

如果我们定义温度差 $\Delta T = [T(y=L) - T(y=0)]$，以及热阻 $R = L/(\rho S)$，则方程（5.7）可以化简为一个与流入热功率和棒两端温度差有关的简单的方程：

$$P = \frac{\Delta T}{R} \tag{5.8}$$

方程（5.8）与欧姆定律相仿。因此，分析光子器件内的热流与分析电路里的电流方法相同。最后一个结论是，热阻与棒的长度成正比，与棒的横截面成反比。因此，到热源路径越长，如在器件中和热沉中，器件的工作温度越高。另一方面，器件的工作温度可以通过热沉散热。

5.2　光子器件中的热流

了解器件工作温度非常重要，因为它影响光子器件的可靠性、输出功率和光束参数。通常，工作温度升高会对光子器件的整体性能造成负面影响。除了一些应用会靠升高工作温度实现特殊的功能，如集成光学器件中的热控开关[6]。

为了预测光子器件工作温度，需要正确确定主热源和主热流路径。热源可以通过对器件工作的物理理论的深入了解进行推测，而光子器件内的热流分布与其内部结构和封装方式有关。所以，光子器件的热管理与封装技术密切相关。为了将这些一般描述与实践相结合，我们首先对半导体激光器二极管 C 接口封装进行一个简要描述。

激光器二极管一般有三种常用封装形式，C 接口、T－管状接口和蝶形封装。对 C 接口封装，不需要破坏外壳就可以看到其内部结构（见图 5.3）。

二极管焊在衬底上可以减小机械应力。衬底放在热沉上，可以散掉器件发的热。热流从激光器，经衬底传导到热沉。因此，激光器和热沉之间存在温度差。此外，半导体激光器芯片内也有非均匀温度分布。这是因为，大多数激光器二极管发热得位置都在有源区附近[7]。由于空气的热容非常小，所以热流从有源区到衬底主要通过激光器内介质本身[8]。由于激光器材料的热容有限，热流从有源区到衬底扩散，会在激光器内形成一个温度梯度。所以，有源区的温度不仅与热沉参数有关，也与激光器自身内部结构有关。此外，激光器二极管的工作温度，也与激光器是在 n 触点还是 p 触点焊接在衬底上有关。这两种情况分别称为“p 朝下”和“n 朝下”封装（见图 5.4）。

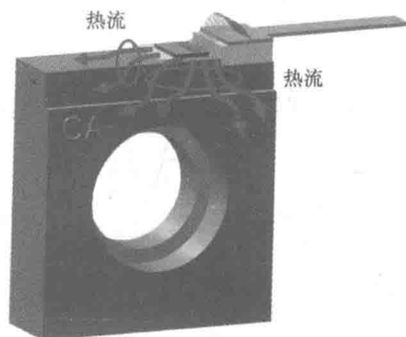


图 5.3　C 接口封装的激光器到热沉间的热流示意图

激光器二极管以何种方式焊接在衬底上，与有源区工作温度有关。这是因为，焊接方式的不同是激光器的内部多层结构决定的。为了理清这个问题，图 5.5 表示了一个“n 朝下”焊接到热沉上的边发射二极管的截面示意图。典型激光器尺寸如图 5.5 所示，其中黑色箭头方向为主热流路径。从量子阱（QW）到 n 触点和 p 触点的距离相差很大。这是因为典型的激光器二极管一般在 n 衬底上生长。在流片的最后一步，衬底会做薄。但是，变薄的衬底的最小厚度也大约为 100μm，以保证器件有足够的机械强度。这使得和“p 朝下”封装的器件相比，“n 朝下”封装的器件，热源到热沉的距离较大，所以从热源到热沉间的热阻也较大，有源区工作温度较高。有关半导体激光器二极管封装的更多信息，可以参考激光器二极管制造商的网页以及 Ronnie 文献[9]。

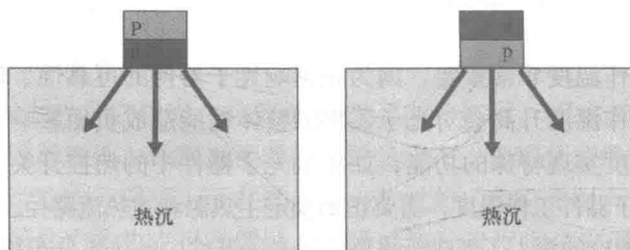


图 5.4　激光器二极管“p 侧”和“n 侧”封装示意图

当已知激光器二极管的内部结构和焊接方式后，理论上可以计算出器件内的温度分布。不过，在计算其温度分布时，会立刻遇到一个问题：激光器外界尺寸大于

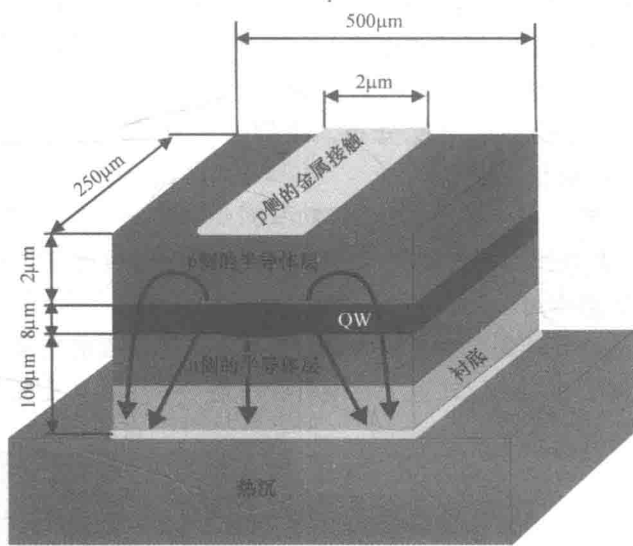


图 5.5　边发射激光器二极管示意图

1cm（热沉），而内部结构在纳米量级（QW 的宽度为几个纳米）[7]。因此，将激光器二极管分为两个子区域进行热建模较为方便（见图 5.6）。其中一个子区域为激光器二极管本身，而另一个子区域为热沉，也可以包含衬底。可以按照每个子区域对处理其相应的问题。图 5.6 中子区域 2 的问题，包括设计一个冷却系统，利用热沉和环境间的热交换过程，即热传导、热对流和热辐射，有效地将激光器二极管产生的热耗散掉。这种情况中，激光器二极管可以视作为一个表面热源，它的总功率等于激光器二极管发热的总功率（见图 5.7）。当设计热沉时，激光器二极管的总发热功率，可以通过计算电功率（等于偏置电压和工作电流的乘积）减去器件光功率相对精确的估计出来。制造商的数据手册中一般都有所有这些所需的数据。唯一一个不知道的数据，是表面热源的空间分布，该参数可以通过两个区域的温度分布的自洽计算求得。不过，在初始分析中，通常会假设一个均匀表面热源分布。

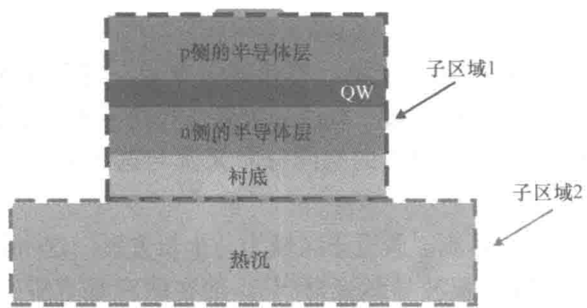


图 5.6　激光器二极管热分析中的两个子计算区域

通过热沉散热的目的，是维持热沉顶部的温度在一个理想的范围内。高热沉温度会造成高有源区温度，从而导致光功率大幅度下降，甚至造成器件不可复原的损坏。而温度过低又会造成激光器二极管表面结露。

为了计算热沉在稳态的温度分布，我们需要计算外部热源情况下的方程(5.4)。储藏能量的瞬态变化为

$$\nabla(\rho\nabla T)=0 \tag{5.9}$$

方程（5.9）在合适的边界条件下可解，边界条件可由环境温度和表面热源分布求得。这个问题通常可以用解析法求解。

第一个子区域的问题是，在已知内部热分布和环境温度的情况下，计算激光器二极管内部的温度分布。热沉在这个时候可看作是一个热阻（见图5.8）。



图5.7　图5.6中有关子区域2的问题

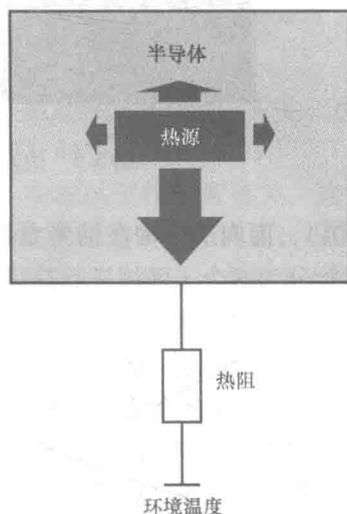


图5.8　图5.6中子区域1的问题

通常，对子区域2进行实验测量，和仿真相结合可以得到热阻的值。考虑激光器二极管的热传导率并不是均匀的，在静态情况下计算温度分布需要求解：

$$\nabla(\rho\nabla T)=-Q \tag{5.10}$$

在求解方程（5.10）之前，需要计算热源分布Q。这个计算并不简单，而且需要仿真计算电流分布、电场分布、载流子浓度，和光子密度分布，这些物理量的空间分布都与热分布有关。而热源的空间分布又都与这些量的空间分布有关（见本书第7章）。

考虑边发射二极管的热流，假设子区域为一个长方形。这一类情况也适用于研究集成光开关[10]和掺镧平板波导激光器[11]。而在研究垂直阱半导体激光器和光纤激光器时，会遇到圆形对称子区域（见图5.9）[12-14]。例如，掺镧光纤的芯区

发出的热会呈辐射状通过光纤的外表面。在下一节中，我们会研究长方形和圆形区域的热流问题。

热传导的数值分析方法，多年来在众多工程学领域都得到了研究和发展。文献 [15 - 17] 列出了一些书籍供参考。光子器件中有两种完善的热传导分析数值方法，他们是 FDM 和有限元法 (Finite Element Method, FEM)。这两种方法稳健性好，且理论上可以解决光子器件热流相关的任何问题。不过，这两种方法对应的算法需要占用相对较多的计算机内存且耗时较长。其他用于分析热传导的数值方法的计算效率相对更高，如边界元法 (Boundary Element Method, BEM)。很多情况下，BEM 的计算效率要高于 FEM 和 FDM，不过，BEM 在分析非均匀介质热传导分布是，其计算效率会显著下降。Minkowycz 等人的文献[17] 中给出了一个对各种用于分析热传导的数值方法的概述。有关 BEM 计算温度分布的更深入的研究，请参考 Reddy 等人的文献[21]。

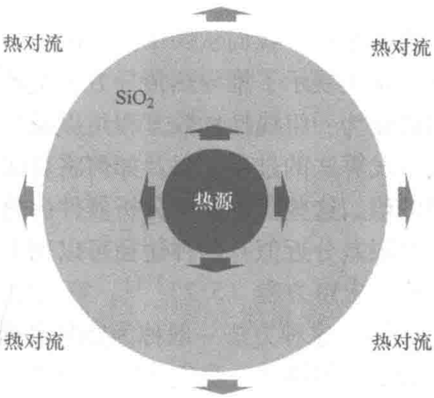


图 5.9　光纤中的热流示意

在下面一节中，我们将对 FDM 分析光子器件中的热流进行一个概述。特别是，我们将求方程 (5.9) 和方程 (5.10) 的解。在随后的一节中，我们将研究均匀介质中的热流。而在“有限差分分析非均匀介质中的热流”一节中，我们将研究非均匀介质中的热传导突变不连续。因为光子器件使用的材料的热容差别很大，所以对热传导的不连续需要谨慎处理 (见表 5.1)。我们还会展示一个器件横截面温度分布的 2D 分析实例 (忽略了纵向温度扩散过程)。一般的，这一过程是在光子器件建模之后进行[7,13,22]。不过，一些情况需要全 3D 模型，例如对金线键合的影响进行建模[23]，以及对灾变镜像损伤进行建模[24]。

表 5.1　一些材料的热传导率

材料	应用	热传导率/ (W/ (m·K))
空气	环境	0.026
铝 (99.6% Al_2O_3)	激光器二极管衬底	27
GaAs	激光器二极管基底	46
锡/铅	焊盘	50
铜	热沉	400
硅玻璃	光纤	1.38

5.3　均匀介质中热流的有限差分分析

在本节中，我们从四个简单的实例出发，展示 FDM 在分析均匀介质热流中的应用。实例展示了推导热传导方程组的有限差分近似的过程，在这个推导中涉及方程组转化为一组线性代数方程组以及如何对其进行数值求解。要特别注意从问题求解到开发算法的过程，以及如何将算法转换为计算机程序，从而得到计算域内温度分布的值。这些实例都与分析器件内热流的问题相关。

有限差分近似有两种途径可以用于研究热流问题。第一种方法基于泰勒级数的严密推导求解方程（5.2）[25]。第二种方法基于对热流现象物理原理的理解求解方程（5.1）。这种方法一般称为能量平衡方程法[19]。

为了完整器件，我们将用这两种方法求解静态泊松方程。首先，我们用能量平衡法。我们将整个空间分为一组相邻的正方体，并考虑热通量从每个这正方体的侧壁流入流出。图 5.10 所示为元素正方体（灰色阴影标记），以及一组节点。根据方程（5.3b），将温度的导数用中心差分近似：

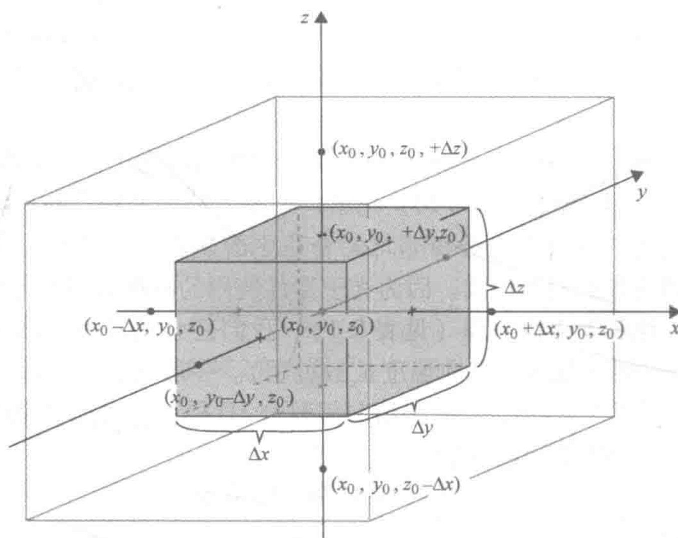


图 5.10　3D 下有限差分网格元素

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0+\Delta x/2} \approx \frac{T(x_0+\Delta x)-T(x_0)}{\Delta x}$$

得到如下通过正方体表面垂直 x 轴方向 $x=x_0+\Delta x/2$ 的热通量：

$$\Delta y \Delta z q_{x_0+\Delta x/2} = \rho\left(x_0+\frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right)\Delta y \Delta z \frac{T(x_0+\Delta x, y_0, z_0)-T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta x}$$

$$= \frac{\Delta T\left(x_0 + \frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right)}{R\left(x_0 + \frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right)} \tag{5.11}$$

其中，ΔT 和 R 定义为

$$\Delta T\left(x_0 + \frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right) = T(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) - T(x_0, y_0, z_0) \tag{5.12a}$$

$$R\left(x_0 + \frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right) = \frac{\Delta x}{\rho\left(x_0 + \frac{\Delta x}{2}, y_0, z_0\right)\Delta y \Delta z} \tag{5.12b}$$

对其他正方体的表面按相同办法处理，则式（5.1）中的热通量项可近似为如下形式：

$$\oiint_S \vec{q}\,\mathrm{d}S \approx \Delta y \Delta z(q_{x_0+\Delta x/2} + q_{x_0-\Delta x/2}) + \Delta x \Delta z(q_{x_0+\Delta y/2} + q_{x_0-\Delta y/2}) + \Delta y \Delta x(q_{x_0+\Delta z/2} + q_{x_0-\Delta z/2}) \tag{5.13}$$

产热项可近似为

$$\iiint_V Q\mathrm{d}V \approx \Delta x \Delta y \Delta z Q(x_0, y_0, z_0) \tag{5.14}$$

合并式（5.13）和式（5.14），可以看到当正方体为均匀介质，忽略温度的瞬态变化时，可得到如下式（5.1）的近似式，其中热传导率 ρ 为

$$\begin{aligned}
&\Delta y \Delta z\left(\frac{T(x_0 + \Delta x, y_0, z_0) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta x} + \frac{T(x_0 - \Delta x, y_0, z_0) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta x}\right) \\
&\quad + \Delta x \Delta z\left(\frac{T(x_0, y_0 + \Delta y, z_0) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta y} + \frac{T(x_0, y_0 - \Delta y, z_0) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta y}\right) \\
&\quad + \Delta y \Delta x\left(\frac{T(x_0, y_0, z_0 + \Delta z) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta z} + \frac{T(x_0, y_0, z_0 - \Delta z) - T(x_0, y_0, z_0)}{\Delta z}\right) \\
&\quad = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{Q(x_0, y_0, z_0)}{\rho}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

对比式（5.15）和式（5.8），可将式（5.15）近似等效为一个由图 5.10 基本元素单元构成的热阻回路，如图 5.11 所示。

在 2D 情况下，面积分可化简为线积分，而体积分可以化简为面积分。因此，对图 5.12 中的有限差分网格，能量平衡法可得到方程（5.1）的如下近似形式：

$$\begin{aligned}
&\Delta y\left(\frac{T(x_0 + \Delta x, y_0) - T(x_0, y_0)}{\Delta x} + \frac{T(x_0 - \Delta x, y_0) - T(x_0, y_0)}{\Delta x}\right) \\
&\quad + \Delta x\left(\frac{T(x_0, y_0 + \Delta y) - T(x_0, y_0)}{\Delta y} + \frac{T(x_0, y_0 - \Delta y) T(x_0, y_0)}{\Delta y}\right) = \Delta x \Delta y \frac{Q(x_0, y_0)}{\rho}
\end{aligned} \tag{5.16}$$

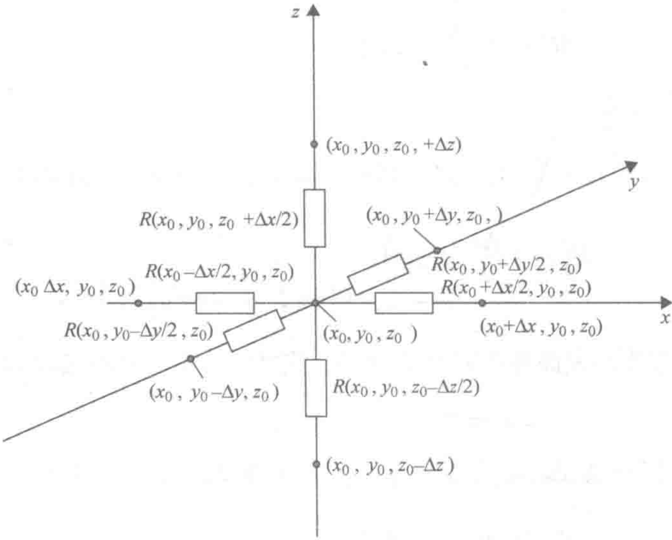


图 5.11　由图 5.10 中有限差分节点构成的等效热阻网络

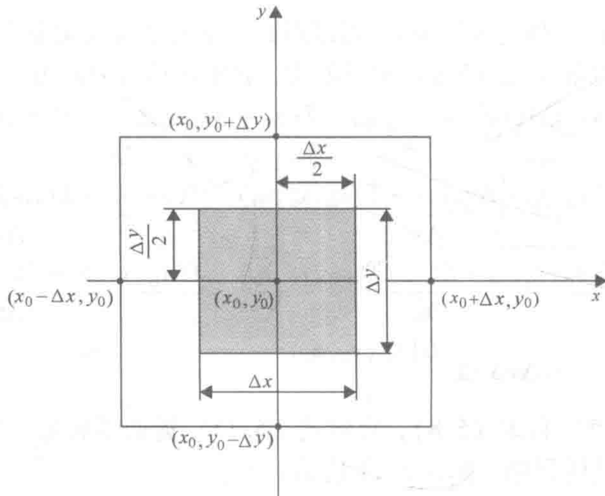


图 5.12　2D 情况下一个有限差分网格的元素

能量平衡法的一个重要优点，是它可以轻松的将推导 5.1 近似的过程扩展到非标准有限差分网格上[19]。

现在，作为对比，我们将用泰勒级数推导方程（5.2）的有限差分近似。考虑 2D 稳态情况，式（5.2）可以化简为

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2 T}{\partial^2 y}=\frac{Q}{\rho} \tag{5.17}$$

我们首先推导 T 对 x 二阶导数的有限差分近似。在 $x=x_0+\Delta x$ 处 T 的泰勒级数展开为

$$T(x_0+\Delta x)=T(x_0)+\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\Delta x+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\Delta x^2+\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\Delta x^3+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^4+\cdots \tag{5.18a}$$

同样，在 $x=x_0-\Delta x$ 处，有

$$T(x_0-\Delta x)=T(x_0)-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\Delta x+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\Delta x^2-\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\Delta x^3+24\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^4+\cdots \tag{5.18b}$$

将式（5.18a）和式（5.18b）联立，用 $x=x_0$、$x=x_0+\Delta x$ 和 $x=x_0-\Delta x$ 表示 $x=x_0$ 处的二阶温度微分，并在两侧除以 Δx^2，可得：

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\approx\frac{T(x_0+\Delta x)-2T(x_0)+T(x_0-\Delta x)}{\Delta x^2}-\frac{1}{12}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^2 \tag{5.19}$$

在式（5.19）中，还存在误差项。因为这个误差项正比于 Δx^2，所以近似式有二阶精度。同样，我们可以对 y 的二阶导数求近似式：

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{y=y_0}\approx\frac{T(y_0+\Delta y)-2T(y_0)+T(y_0-\Delta y)}{\Delta y^2}-\frac{1}{12}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial y^4}\right|_{y=y_0}\Delta y^2 \tag{5.20}$$

将式（5.19）和式（5.20）带入式（5.17），可得到在点（x_0，y_0）处式（5.17）的近似式：

$$\left.\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)\right|_{(x=x_0,y=y_0)}\approx\frac{T(x_0+\Delta x,y_0)-2T(x_0,y_0)+T(x_0-\Delta x,y_0)}{\Delta x^2}+\frac{T(x_0,y_0+\Delta y)-2T(x_0,y_0)+T(x_0,y_0-\Delta y)}{\Delta y^2}-\frac{1}{12}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial y^4}\right|_{y=y_0}\Delta y^2-\frac{1}{12}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^2=\frac{Q(x_0,y_0)}{\rho} \tag{5.21}$$

将式（5.16）除以 $\Delta x\Delta y$，并忽略式（5.21）中的误差项，可以看出这两个方程是等价的。所以，两种方法实际上得到了一个相同的描述热流的方程近似式。第一种方法可以相对简单的确定器件内热流的主要路径，而且可以更简单的应用于不连续介质或是非标准网格。而后一种方法可以快速得到误差估计。在本节中，我们将更多的基于泰勒级数，严谨的推导有限差分近似。而在下一节中，我们将用能量

平衡法。现在我们回过来，研究一组简单的实例，解释 FDM 如何用于研究热传导。

首先，我们考虑一个无限长的铜棒，并计算在给定边界温度分布的情况下，它的横截面温度分布（见图 5.13）。这个铜棒可以近似表示光子器件的热沉。我们假设，边界温度分布在沿着棒的方向上不变，即其与 z 空间变量无关。我们考虑当 $W=H=1\text{cm}$ 的情况，并引入一组等间距的采样点，其间距为 $\Delta x=\Delta y=W/4$（见图 5.14）。当无热源下 $\Delta x=\Delta y$ 时，方程（5.21）化简为特别简单的形式：

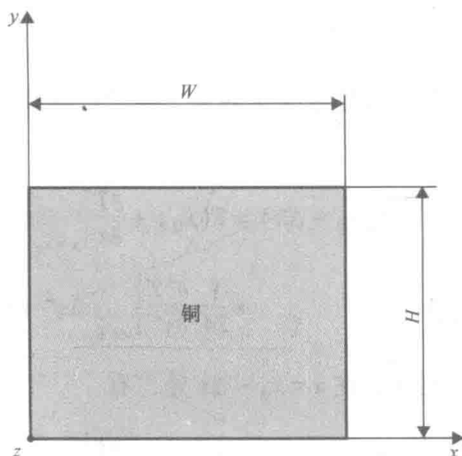


图 5.13 铜棒的横截面

$$\frac{T(x_0+\Delta x,y_0)+T(x_0-\Delta x,y_0)+T(x_0,y_0+\Delta y)+T(x_0,y_0-\Delta x)-4T(x_0,y_0)}{\Delta x^2}+O(\Delta x^2)=0 \tag{5.22}$$

式中，$O(\Delta x^2)$ 表示正比于 Δx 的二阶和高阶功率的项。

式（5.22）的形式表示，拉普拉斯方程的有限差分近似可以很方便地用图 5.15 的模板表示，相邻节点的号码给出了温度节点值的有限差分宽度。

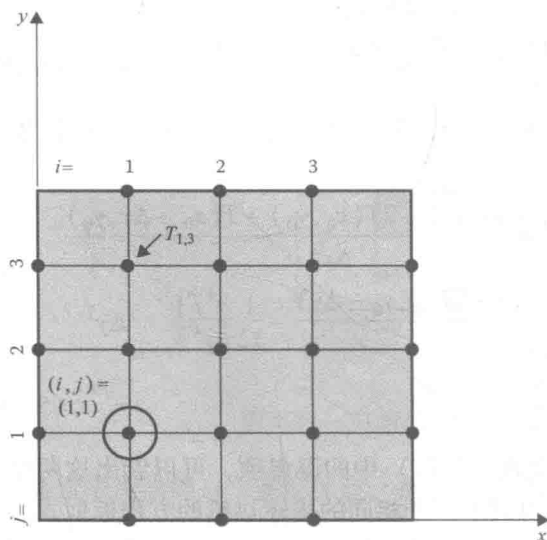


图 5.14 图 5.13 铜棒横截面的采样点选择

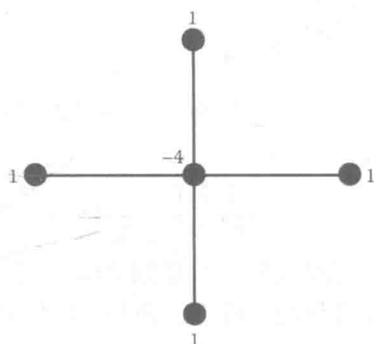


图 5.15 拉普拉斯方程（5.11）的有限差分格式近似

在所选的采样点中，外边界上的所有点的温度已知。所以，我们有 9 个点的温度未知。对每个温度未知的点写出方程（5.22），可以得到包含 9 个未知数的 9 个方程，每个都可以用线性代数解法求解。图 5.16 所示为设置每个节点及其方程的过程。

写出每个节点的有限差分方程，并将它们写成矩阵形式，每行编号对应了节点编号：

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -T_{0,1}-T_{1,0} \\ -T_{2,0} \\ -T_{4,1}-T_{3,0} \\ -T_{0,2} \\ 0 \\ -T_{4,2} \\ -T_{0,3}-T_{1,4} \\ -T_{2,4} \\ -T_{4,3}-T_{3,4} \end{bmatrix} \tag{5.23}$$

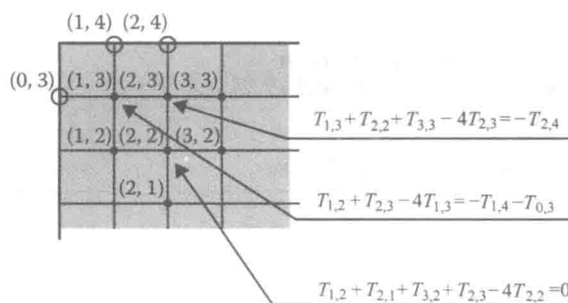


图 5.16　所选节点上的拉普拉斯方程（5.11）有限差分近似

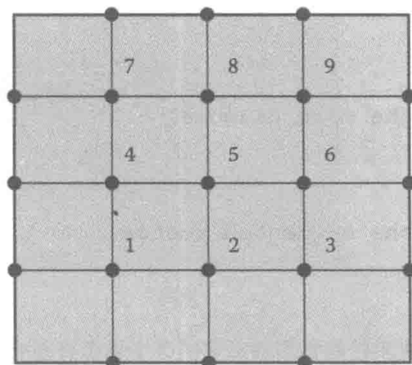


图 5.17　图 5.13 中铜棒的 9 个差分点编号

方程（5.23）可以写成更加紧凑的形式：

$$AT=\bar{b} \tag{5.24}$$

式中A为系数矩阵；T为包含所有未知温度值的向量，而向量$\bar{b}$包含了方程（5.23）的右侧。代数方程组的解为器件内的温度分布。

算法5.1总结了对边界温度值用FDM求解方程（5.17）的所有必要步骤（在无热源的情况下）。

算法5.1　有限差分法求解拉普拉斯方程求定温边界值

1. 开始；
2. 选择Δx、Δy和采样节点；
3. 给定边界温度值，组成系数矩阵和变量向量；
4. 通过求解线性代数方程（5.23）求解节点的温度值；
5. 停止。

下面，我们用MATLAB软件执行算法5.1，计算当边界温度恒定等于300K时，方程（5.24）的解，我们采用9个节点。

```
% program calculates temperature distribution
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format short

Nx = 3;% number of points along x axis
Ny = 3;% number of points along y axis
N = Nx*Ny;%total number of points

for i = 1:N% setting off diagonals
a1(i) = 1;
a2(i) = 1;
a4(i) = 1;
a5(i) = 1;
end

for i = 1:Ny% setting zeros in off diagonals
a4((i-1)*Nx+1) = 0;

a2(i*Nx) = 0;
end
for i = 1:N% setting the main diagonal
a3(i) = -4;
end

for i = 1:N% setting the augmented vector
b(i) = -300;
end
b(1) = -600;
b(Nx) = -600;
b(N-Nx+1) = -600;
b(N) = -600;
```

```
for j = 2:Ny-1
for i = 2:Nx-1
      b((j-1)*Nx+i) = 0;
end
end

c = [-Nx,-1,0,1,Nx];%setting the matrix pattern
%forming directly the matrix in sparse format
A = spdiags([a1' a2' a3' a4' a5'], c, N, N);
% a1-a5 are transposed
x = A\b'% solving the set of equations
```

由最大值原理，即拉普拉斯方程解的最大值应位于边界，程序可以得到全域的温度为常数。

如果边界温度并不是常数时，MATLAB 程序中扩展向量 b 需要修正，并增加采样点数量，以得到足够精确的解。因此，MATLAB 程序中采用了稀疏矩阵。因为系数矩阵 A 是一个对称阵，且它的行列式是一个五角对角行列式，所以代数方程（5.24）可以通过各种数值方法求解。最常用的方法是带状矩阵的 LU 分解法、高斯－赛德尔法、逐次超松弛（Successire Over－Relaxation，SOR）法、交替方向隐式（Alternate Direction Implicit，ADI）法和投影法，如 Arnoldi 和 CG 法[26,27]。

第二个实例，我们考虑与上一个实例相同的棒，但是边界条件不同，如图 5.18 所示。

表 5.2　图 5.17 给出的节点求解图 5.13 问题得到的温度值

节点号	1	2	3	4	5	6	7	8	9
温度/K	300	300	300	300	300	300	300	300	300

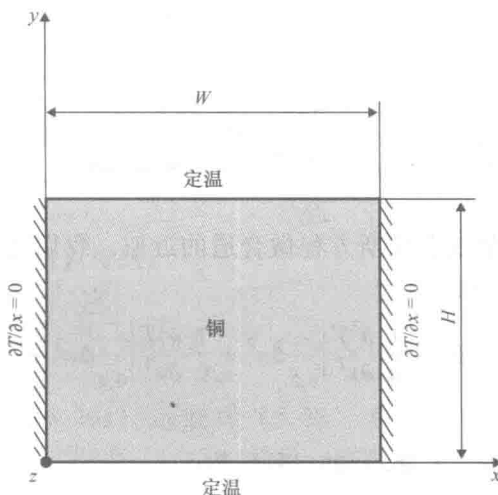


图 5.18　在垂直边界上采用零法线微分条件的铜棒横截面

在垂直边界上，我们让法线的微分为零。该边界条件对应了边界上没有热通量通过（参考式（5.3b））。我们再一次用上一实例中相同的正方体，其 $W=H=1\text{cm}$。然后引入这样的正方形有限差分网格（见图5.19a）。所以，与上一个实例唯一不同的地方在于，铜棒的垂直侧壁上温度的法线微分为零。因此，我们首先考虑如何处理这样的边界条件。如实例所示，我们推导拉普拉斯方程在节点 $(i,j)=(1,2)$ 上的有限差分近似，参考图5.19a：

$$\frac{T_{1,3}+T_{2,2}+T_{0,2}+T_{1,1}-4T_{1,2}}{\Delta x^2}+O(h^2)=0 \tag{5.25}$$

在节点 $(i,j)=(0.2)$ 上的温度值未知。不过，我们知道在节点 $(i,j)=(0.2)$ 温度导数的值：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0.2}$$

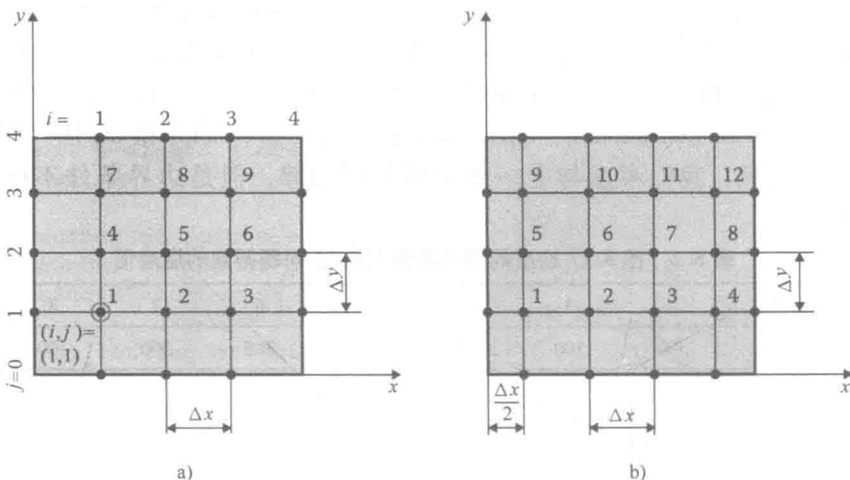


图5.19 a）图5.18中棒的有限差分节点编号
b）图5.18中棒问题的有限差分节点平移 $\Delta x/2$

为了对微分边界条件的拉普拉斯方程做合适的近似，我们将 $x_0=x_{0.2}$ 和 $x_0+\Delta x=x_{1,2}$ 代入式（5.18），得到：

$$T_{1,2}=T_{0,2}+\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0,2}\Delta x+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{0,2}\Delta x^2+\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{0,2}\Delta x^3+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{0,2}\Delta x^4+\cdots \tag{5.26a}$$

对 $T_{0,2}$，取到方程（5.26a）的二阶导数：

$$T_{0,2}\approx T_{1,2}-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0.2}\Delta x-\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{0,2}\Delta x^2 \tag{5.26b}$$

代入方程（5.25）：

$$\frac{T_{1,3}+T_{2,2}-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0,2}\Delta x+T_{1,1}-3T_{1,2}}{\Delta x^2}-\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{0,2}+O(\Delta x^2)=0 \qquad (5.27)$$

因为

$$-\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{0,2}$$

引入了一个 $O(\Delta x^0)$误差项，所以方程（5.27）的整体精度相对方程（5.22），劣化为零阶。为了提升有限差分近似的精度，可以用中心导数近似节点$(i,j)=(0,2)$的温度导数[28]

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{0,2}$$

另一种方法，是将节点平移 $\Delta x/2$，并将 T 在 $x=x_0+\Delta x/2$ 处做泰勒级数展开：

$$T\left(x_0+\frac{\Delta x}{2}\right)=T(x_0)+\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x}{2}+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^2}{4}+\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^3}{8}+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^4}{16}+\cdots \qquad (5.28a)$$

同样，在 $x=x_0-\Delta x/2$ 处：

$$T\left(x_0-\frac{\Delta x}{2}\right)=T(x_0)-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x}{2}+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^2}{4}-\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^3}{8}+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\frac{\Delta x^4}{16}+\cdots \qquad (5.28b)$$

用式（5.28a）减去式（5.28b），并重新整理，可得一阶导数的近似：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}=\frac{T\left(x_0+\frac{\Delta x}{2}\right)-T\left(x_0-\frac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x}-\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\Delta x^2+\cdots \qquad (5.29a)$$

忽略误差项和高阶项，可以得到一阶导数的近似：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\approx\frac{T\left(x_0+\frac{\Delta x}{2}\right)-T\left(x_0-\frac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x} \qquad (5.29b)$$

由式（5.29a），还可以得到：

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\approx\frac{\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0+\frac{\Delta x}{2}}-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0-\frac{\Delta x}{2}}}{\Delta x}-\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^2 \qquad (5.30)$$

可以看到，用式（5.29a）近似式（5.28）右侧的一阶导数，可以得到式（5.13），所以式（5.30）和式（5.13）等价。需要注意的是，式（5.29a）存在误差项，即

$$\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0+\Delta x/2}\Delta x^2 \text{ 和 } \frac{1}{24}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0-\Delta x/2}\Delta x^2$$

设式（5.30）中误差项前的系数为1/12，与式（5.13）相同。

为了在临近垂直壁上节点用有限差分近似式（5.30），我们需要将采样点平移$\Delta x/2$（见图5.19b）。

现在，零微分边界条件可以直接写为

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x_0+\frac{\Delta x}{2}} \text{或} \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}$$

具体采用哪种形式取决于垂直边界临近网格节点的左侧还是右侧。式（5.30）的其他一阶导数可以用式（5.29a）近似。

为了简单起见，这里我们用式（5.27）处理所有临近垂直壁的节点，用式（5.25）处理其他节点。在本实例中，温度对x的二阶导数等于零，所以零阶误差项不存在了。不过，需要注意的是，在二阶导数不等于零的情况下，做这样的处理会显著降低结果的精度。所以，一般需要用式（5.30）或者Strikwerda[28]的方法处理。

联立所有九个节点的有限差分方程（见图5.19），可得如下九元代数方程组：

$$\begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -T_{1,0} \\ -T_{2,0} \\ -T_{3,0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -T_{1,4} \\ -T_{2,4} \\ -T_{3,4} \end{bmatrix} \tag{5.31}$$

系数矩阵和上一实例中的系数矩阵有相同的结构，所以可以用求解方程（5.29）的相同解法求解。我们设棒顶端的温度为330K，底端的温度为300K。这样，可以得到温度分布的解析解，即$T(x,y)=330\text{K}-(30\text{K/cm})*y$。图5.18问题的求解如算法5.2所示。

算法5.2　有限差分法求解方程（5.11）求图5.18的边界条件

1. 开始；
2. 选择Δx、Δy和采样节点；
3. 给定边界温度值和温度导数值，组成系数矩阵和变量向量；
4. 通过求解线性代数方程（5.31）求解节点的温度值；
5. 停止。

只需要对上一实例中的代码做微小的修改即可实现算法5.2。节点的温度计算值见表5.3。

需要注意的是，虽然采样点数量很少，但数值计算得到的温度结果（15 位）与分析法的结果相同。这个结果是有限差分近似的一个性质，所有 2 阶以下多项式都满足这个性质[29]。

表 5.3 按图 5.19a 中的节点计算图 5.18 问题的温度值

节点编号	温度/K	
	数值解	解析解
1	307.5	307.5
2	307.5	307.5
3	307.5	307.5
4	315	315
5	315	315
6	315	315
7	322.5	322.5
8	322.5	322.5
9	322.5	322.5

下一个问题如图 5.20 所示。我们再一次考虑相同的棒。不过，在本实例中，在棒的顶端，我们放置了一个热源，其总热功率为 P_H。这个热源表示了焊在铜热沉上的激光器二极管（见图 5.5）。

如果热源的全部横截面上热通量均匀分布，则热通量的 y 分量为 $q_y = P_H/(WL)$。由式（5.4b）得

$$q_y = -\rho_c \frac{\partial T}{\partial y}$$

式中，ρ_c 为铜的热导率。从而我们可以得出临近热源的法线导数条件：

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{q_y}{\rho_c} \tag{5.32a}$$

或均匀分布热源条件：

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{P_H}{\rho_c WL} \tag{5.32b}$$

对任意热通量分布，可以使用更一般的条件式（5.32a）。注意式（5.23）里的“+”对应了图 5.20a 中沿着 y 负方向的热流。

现在，我们再一次用式（5.27），并代入式（5.32b），对所有临近热源的节点推导式（5.13）的近似式。我们假设热源的宽度等于棒的宽度。我们引入一系列

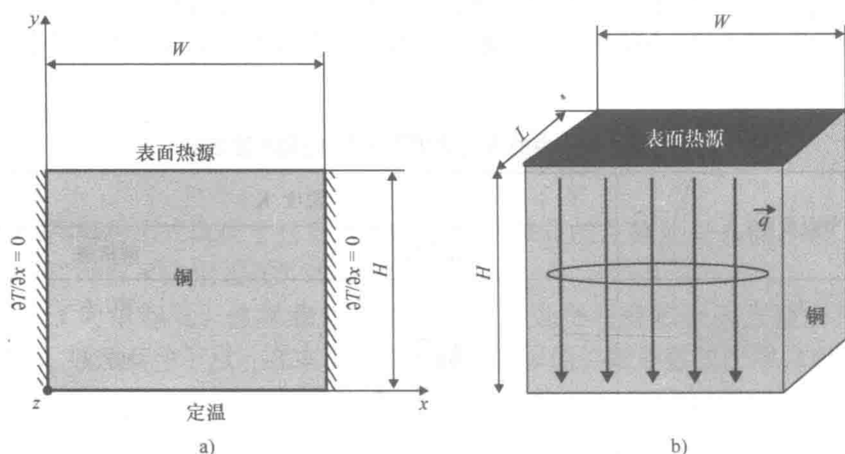


图 5.20　由表面热源的铜棒

采样点（见图 5.21），在临近热源的采样点有

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)\bigg|_{2,3}\approx\frac{\dfrac{P_{\mathrm{H}}\Delta y}{\rho_{\mathrm{c}}WL}+T_5-3T_8+T_7+T_9}{\Delta x^2}=0 \tag{5.33a}$$

同样，对上角的节点，我们有

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)\bigg|_{1,3}\approx\frac{\dfrac{P_{\mathrm{H}}\Delta y}{\rho_{\mathrm{c}}WL}+T_4-2T_7+T_8}{\Delta x^2} \tag{5.33b}$$

对下角的节点：

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)\bigg|_{1,1}\approx\frac{-3T_1+T_2+T_4+T_{1,0}}{\Delta x^2} \tag{5.33c}$$

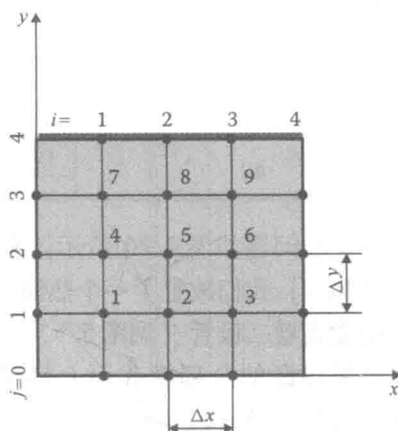


图 5.21　图 5.20 问题棒上的有限差分节点编号

方程（5.15）和方程（5.37）可以用于所有其他节点，这样我们可以按矩阵向量积形式，写出有限差分方程组：

$$\begin{bmatrix} -3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -T_{1,0} \\ -T_{2,0} \\ -T_{3,0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ b \\ b \\ b \end{bmatrix} \tag{5.34}$$

系数 b 定义为

$$b = -\frac{P_{\mathrm{H}}\Delta y}{\rho_{\mathrm{c}} WL}$$

式（5.34）中的系数矩阵是对称阵，因此可以按照上一例中相同的步骤处理。算法 5.3 列出了所需的所有步骤。

算法 5.3　有限差分法求解方程（5.11）求图 5.20 的边界条件

1. 开始；
2. 选择 Δx、Δy 和采样节点；
3. 给定边界温度值和温度导数值，组成系数矩阵和变量向量；
4. 通过求解线性代数方程（5.34）求解节点的温度值；
5. 停止。

同样，只需要稍微更新上一例的 MATLAB 代码，就可以执行算法 5.3。我们设管底部的温度为 300K。这种情况下，解析计算可得温度分布为

$$T(x,y) = \frac{P_{\mathrm{H}}\Delta y}{\rho_{\mathrm{c}} WL} y + 300\mathrm{K}$$

如果我们进一步设 $P_{\mathrm{H}} = 4\mathrm{W}$（半导体二极管相对典型的值）、$L = 1\mathrm{cm}$，$\rho_{\mathrm{c}} = 400\mathrm{W/m \cdot K}$，则可以同时得到温度分布的解析解和数值解。计算的节点温度值见表 5.4。

同样，除了接近边界的零阶精度以外，数值结果和解析结果没有差别。这是因为本例中，解只与 y 线性相关，而 y 又保持不变，所以二阶微分本身就等于零。

最后一个例子，我们考虑硅玻璃管带热源的情况（见图 5.22）。这个例子对应了光纤激光器的热流分析[13]。

这个例子的边界条件为定温等于 300K。我们假设玻璃管纵向的温度恒定。因此，为了计算横截面温度分布，我们需要求解 2D 泊松方程：

$$\frac{\partial^2 T}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 T}{\partial^2 y} = -\frac{Q}{\rho} \tag{5.35}$$

表 5.4 按图 5.21 中的节点计算图 5.20 问题的温度值

节点编号	温度/K	
	解析解	数值解
1	302.5	302.5
2	302.5	302.5
3	302.5	302.5
4	305	305
5	305	305
6	305	305
7	307.5	307.5
8	307.5	307.5
9	307.5	307.5

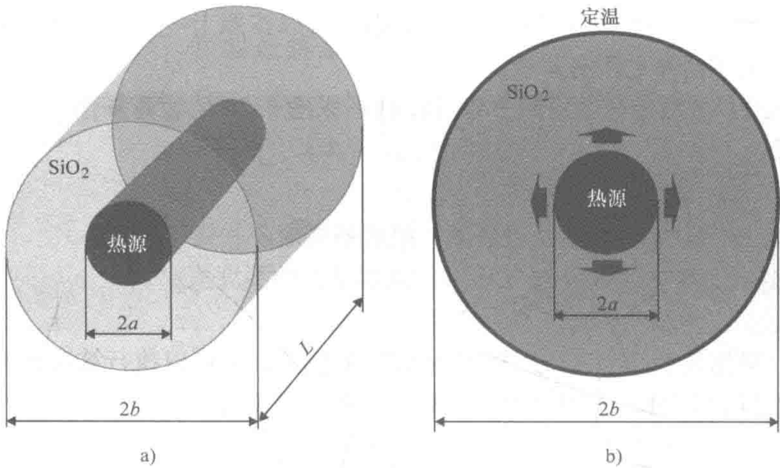


图 5.22 硅玻璃光纤的热流的示意图

a）体热源 b）横截面

与第一个问题相比，这个问题的唯一主要不同在于热源分布。在假设热源均匀分布的条件下，单位时间热源的能量密度为 $Q = P_{HS}/(L/\pi a^2)$，其中 P_{HS} 为热源总功率，假设其等于 200W。我们假设铜棒的长度为 10m，半径为 400μm。热源的半径为 100μm。硅的热导率为 1.38W/（m·K）（见表 5.1）。我们引入如图 5.23 的采样点。注意，与前例不同，节点的间距并不恒定。为了避免模糊，在图 5.23 中，我们将节点序号标在外边界左侧。同样在右侧也做同样的处理。

因为图 5.23 中的节点分布并不平均，所以需要推导更一般的有限差分近似。为此，我们首先用有限差分表示三个节点 $x_0 - \Delta x$，x_0 和 $x_0 + a\Delta x$ 对 x 的二阶导数。我们将 T 在 $x = x_0 + a\Delta x$ 处展开：

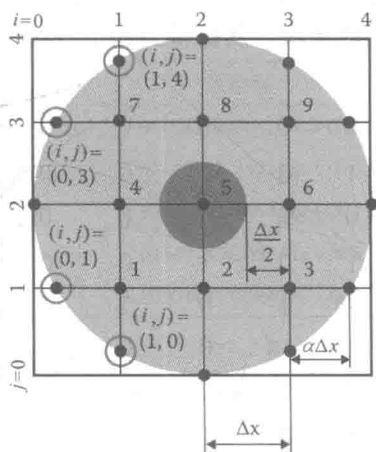


图 5.23　图 5.22 问题的有限差分节点编号

$$T(x_0+a\Delta x)=T(x_0)+\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}a\Delta x+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}a^2\Delta x^2+\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}a^3\Delta x^3+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}a^4\Delta x^4+\cdots \tag{5.36a}$$

同样，在 $x=x_0-\Delta x$ 处：

$$T(x_0-\Delta x)=T(x_0)-\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=x_0}\Delta x+\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\Delta x^2-\frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\Delta x^3+\frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right|_{x=x_0}\Delta x^4+\cdots \tag{5.36b}$$

消除一阶导数的项，可以得到如下二阶导数的近似：

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}\approx 2\frac{T(x_0+a\Delta x)-(1+a)T(x_0)+aT(x_0-\Delta x)}{(a+a^2)\Delta x^2}-\frac{1}{3}\frac{(1+a^2)}{(1+a)}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right|_{x=x_0}\Delta x \tag{5.37a}$$

同样，我们还可得到：

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{y=y_0}\approx 2\frac{T(y_0+a\Delta y)-(1+a)T(y_0)+aT(y_0-\Delta y)}{(a+a^2)\Delta y^2}-\frac{1}{3}\frac{(1+a^2)}{(1+a)}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial y^3}\right|_{y=y_0}\Delta y \tag{5.37b}$$

如对图 5.23 中的节点 3 应用式（5.37），可以得到如下的与式（5.35）左侧近似的式：

$$\left.\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)\right|_{3,1}\approx\frac{2}{(a+a^2)\Delta x^2}(aT_{2,1}+T_{4,1}+aT_{3,2}+T_{3,0}-2(1+a)T_{3,1}) \tag{5.38}$$

同样，我们可以对节点 1、7 和 9 应用有限差分方程。对其他节点，我们用式 (5.13)，注意在节点 5 存在热源项。从而得到如下方程：

$$\begin{bmatrix} -2a_2 & a_1 & 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & -2a_2 & 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 & 0 & 0 & -2a_2 & a_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_1 & 0 & a_1 & -2a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a_3(T_{0,1}+T_{1,0}) \\ -T_{2,0} \\ -a_3(T_{4,1}+T_{3,0}) \\ -T_{0,2} \\ -\dfrac{P_{\mathrm{HS}}\Delta x^2}{\rho_{\mathrm{silica}} L\pi a^2} \\ -T_{4,2} \\ -a_3(T_{0,3}+T_{1,4}) \\ -T_{2,4} \\ -a_3(T_{4,3}+T_{3,4}) \end{bmatrix} \tag{5.39}$$

系数 a_i 为

$$a_1 = \frac{2}{(1+a)}, a_2 = \frac{2}{a}, a_3 = \frac{2}{(a+a^2)}$$

代数方程组（5.36）可以通过与第一个例子相同的方法求解。方程（5.35）的求解图 5.22 问题的解法见算法 5.4。

只需对问题 1 的 MATLAB 代码做微小改进即可实现算法 5.4。节点的温度计算值见表 5.5。

算法 5.4　有限差分法求解方程（5.11）求图 5.22 的边界条件

1. 开始；
2. 选择 Δx、Δy 和采样节点；
3. 计算覆盖热源空间分布的节点上的热源功率密度；
4. 给定边界温度值和热源功率密度值，组成系统矩阵和变量向量；
5. 通过求解线性代数方程组 5.39 求解节点的温度值；
6. 停止。

表 5.5　按图 5.23 中的节点计算图 5.22 问题的温度值

节点编号	温度/K	
	数值解	解析解
1	3.009048877586438e+002	3.007994043483792e+002
2	3.021409874245248e+002	3.015988086967583e+002
3	3.009048877586439e+002	3.007994043483792e+002
4	3.021409874245248e+002	3.015988086967583e+002

（续）

节点编号	温度/K	
	数值解	解析解
5	3.067541741808117e+002	3.043509140825884e+002
6	3.021409874245249e+002	3.015988086967583e+002
7	3.009048877586439e+002	3.007994043483792e+002
8	3.021409874245248e+002	3.015988086967583e+002
9	3.009048877586438e+002	3.007994043483792e+002

可以看到，解析解的结果和数值解的结果之间存在显著的差异。这是因为有限差分网格节点数较少所致。当对有限差分网格做优化后，可以减小解析解和数值解之间的差别，不过，会丧失系数矩阵的五角对角结构。另外可以看出，方程（5.39）存在明显的冗余。这是因为所计算结构的对称性所致。快速浏览表 5.4 可以发现，对温度只有三个不相关变量。实际上，因为对称性平面的存在，我们可以只考虑圆横截面的一个象限。这个象限，如节点 5、7 和 8。这些节点的有限差分方程为式（5.39）的第 5 个、第 7 个和第 8 个方程。这些方程表示的在节点 2、4、6，和 9 的温度值，可以由平面对称等价。例如根据通过节点 7、5 和 3 的平面对称性质，有 $T_4 = T_8$。

用柱坐标表示泊松方程（5.17），可以更好地体现对称性的优点：

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial^2 \theta}=-\frac{Q}{\rho} \tag{5.40}$$

式中，$x = r\cos(\theta), y = r\sin(\theta)$。

实际上，在柱坐标下可以简单地得到问题的解析解[4.5]。方程（5.40）也可以用 FDM 近似[25]。与直角坐标系相比，柱坐标系还有另外两个优点。和直角坐标系相比，柱坐标系引入边界上法向导数的值更方便[19.30.31]，它会得到一个五阶对角稀疏矩阵。如果光纤激光器靠对流制冷，则存在法向导数值[13]。

如果计算域的形状不是长方形，则可以改变网格大小，或采用其他有限差分网格形状——如三角形网格，或采用其他坐标系，用有限差分网格处理问题。上述的方法可参考热流相关的参考文献［19］，偏微分方程的有限差分解可参考文献［25］以及数值建模的标准教材［32，33］。在一些情况中，在非常规边界应用 FDM 会造成系数矩阵失去对角性。这种情况时，可以在计算域内采用规则形状的侵入接口法[30,34]，或者嵌入边界法[35,36]处理。

5.4　非均匀介质中热流的有限差分分析

在上一节中使用的数值方法，无法处理阶梯不连续的热容分布。这个问题的一

个简单的例子如图 5.24 所示。铜的热容ρ_c为 400W/（m·K），而铝的热容比铜小将近 10 倍，为$\rho_A=27W/m\cdot K$（见表 5.1）。因此，两种材料的交界存在一个明显的热容阶梯不连续。在研究衬底到热沉的热流时会遇到这类问题。

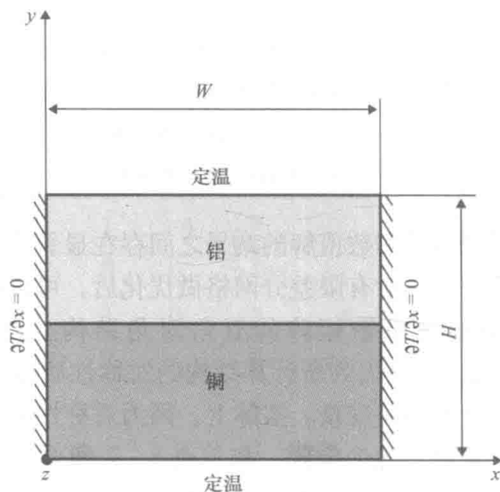


图 5.24 阶梯热传导率分布非均匀区域的热流问题实例

有两种基本方法可以数值求解图 5.24 所示的问题。第一种方法是将所考虑的区域分为定热容的子分区。在每个子分区的给定节点集可以写出有限差分方程，然后将它们联立，然后通过交界面的热流和温度连续性质，可以得到每个子分区的解。另一种方法是在热容不连续的情况下，推导一定精度的有限差分近似，从而将整个问题放在一个计算域内解决。在本节中，我们将对比两种方法。我们将用图 5.24 的问题作为对象。假设$H_C=H_A=H/2$，$H=W=1\text{cm}$。我们还假设两个水平边界的温度分布恒定等于 330K，而底部边界温度等于 300K。同时，我们假设在纵向边界上没有热流通过。

我们首先考虑第一种方法，将计算域分为两个子区域，每个子区域都是均匀介质区。然后设两个区域交界的温度和热通量连续。我们将铜的子区域叫作“子区域 1”，而将铝的子区域叫作“子区域 2”。然后分别在子区域内设采样点。图 5.25 所示为每个子区域内的节点分布，并对节点做了编号。

然后，我们在子区域 1 内的节点，用上一节中的方法处理。我们对节点根据式（5.15）和式（5.21）写出有限差分方程。我们随后对子区域 2 内的节点以相同步骤处理。不过，交界处的节点处理方法不同。在这些点上，我们由热通量连续性，可得热通量的法向分量连续，即

$$\rho_C\frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_C=\rho_A\frac{\partial T}{\partial y}\bigg|_A \tag{5.41}$$

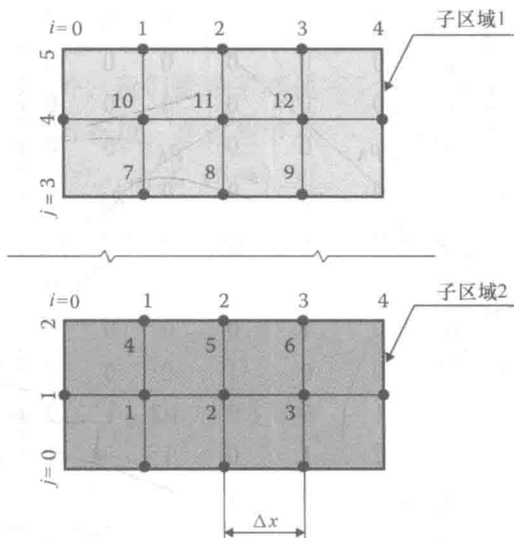


图 5.25　将图 5.24 中的计算域分为两个子区域后的有限差分节点编号

式中，ρ_C 和 ρ_A 分别为铜和铝的热传导率，

$$\left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_C \text{和} \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_A$$

分别为交界面铜和铝一侧的法向导数值。为了求铝一侧的这个导数，我们用式（5.25）得到

$$\left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=y_0} = \frac{T(y_0+\Delta y) - T(y_0)}{\Delta y} - \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{y=y_0}\Delta y - \frac{1}{6}\left.\frac{\partial^3 T}{\partial y^3}\right|_{y=y_0}\Delta y^2 - \frac{1}{24}\left.\frac{\partial^4 T}{\partial y^4}\right|_{y=y_0}\Delta y^3 + \cdots \tag{5.42}$$

忽略高阶项，在 $y=y_0$，可以得到如下一阶导数的有限差分近似：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=y_0} \approx \frac{T(y_0+\Delta y) - T(y_0)}{\Delta y} \tag{5.43}$$

同样，可以得到铜一侧的一阶导数近似：

$$\left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=y_0} \approx \frac{T(y_0) - T(y_0-\Delta y)}{\Delta y} \tag{5.44}$$

将式（5.43）和式（5.44）代入式（5.41），可以得到所需的方程：

$$\rho_C[T(y_0) - T(y_0-\Delta y)] = \rho_A[T(y_0+\Delta y) - T(y_0)] \tag{5.45}$$

我们同样考虑温度分布的连续性。相当于让交界面上的节点 4 和 7，以及节点 6 和 9 等的温度值相等。将所有方程联立，得到如下线性代数方程组：

$$
\begin{bmatrix}
-3 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & -3 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\rho_C & 0 & 0 & -\rho_C & 0 & 0 & -\rho_A & 0 & 0 & \rho_A & 0 & 0 \\
0 & \rho_C & 0 & 0 & -\rho_C & 0 & 0 & -\rho_A & 0 & 0 & \rho_A & 0 \\
0 & 0 & \rho_C & 0 & 0 & -\rho_C & 0 & 0 & -\rho_A & 0 & 0 & \rho_A \\
0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -3 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -3
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \\ T_{10} \\ T_{11} \\ T_{12} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} -T_{1,0} \\ -T_{2,0} \\ -T_{3,0} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -T_{1,4} \\ -T_{2,4} \\ -T_{3,4} \end{bmatrix}
\tag{5.46}
$$

式中，$a_1 = \rho_C - \rho_A$。

按照“有限差分分析均匀介质中的热流”一节相同的步骤，我们可以求出方程（5.46）的解，见表5.6。

表5.6 按图5.25中的节点计算图5.24问题的温度值

节点编号	温度/K	
	数值解	解析解
1	3.009484777517565e+002	3.009484777517565e+002
2	3.009484777517565e+002	3.009484777517565e+002
3	3.009484777517565e+002	3.009484777517565e+002
4	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
5	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
6	3.018969555035130e+002	3.018969555035129e+002
7	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
8	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
9	3.018969555035130e+002	3.018969555035129e+002
10	3.159484777517565e+002	3.159484777517565e+002
11	3.159484777517566e+002	3.159484777517565e+002
12	3.159484777517566e+002	3.159484777517565e+002

现在，我们用第二个方法。节点的分布如图5.26所示。

节点 4、5 和 6 在铜和铝的交界面上。在上一节中，除了在热导率不同的两个介质交界面上的节点以外，我们推导了其他所有节点的有限差分方程组。在这些节点上，方程（5.9）不成立。由式（5.4）可以直接推导出针对这些节点的修正方程，在没有热源和储藏能量瞬态无变化的情况下，取两个均匀区域交界面与 x 轴平行的好处，有

$$\rho\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial y}\left(\rho\frac{\partial T}{\partial y}\right)=0 \qquad (5.47)$$

对 x 的偏导数，我们采用能量平衡法。图 5.27 所示为有限差分网格的一个元素。

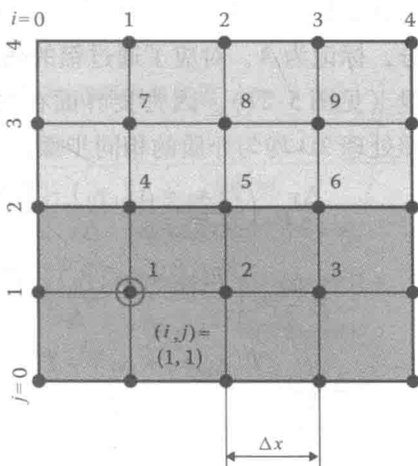


图 5.26　当在全域直接计算温度分布时，图 5.24 问题的有限差分节点的编号

考虑对图 5.27 中所有有限差分网格元素有能量平衡[19]，即，计算方程（5.47）的线积分，可以得到方程（5.47）的近似式：

$$\frac{\Delta y}{2}(q_{x_0+\Delta x/2}+q_{x_0-\Delta x/2})\Big|_A+\frac{\Delta y}{2}(q_{x_0+\Delta x/2}+q_{x_0-\Delta x/2})\Big|_C$$
$$+\Delta x q_{x_0+\Delta y/2}+\Delta x q_{x_0-\Delta y/2}=0 \qquad (5.48)$$

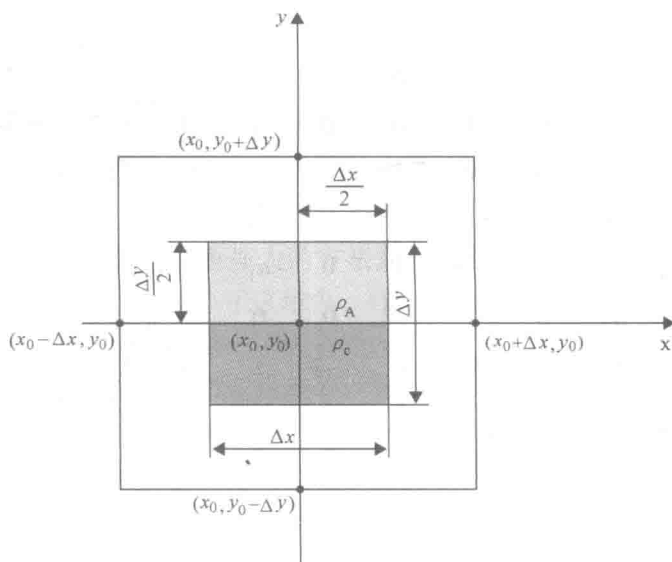


图 5.27　非均匀介质有限差分网格的一个元素

在方程（5.48）中，通过长方形垂直侧面的热通量分为两个部分。其中一个部分，标记为A，对应了通过铝的热通量。另一不同，标记为C，对应通过铜的热通量（见图5.27）。因为交界面在网格节点中间，所以两个部分都乘以了$\Delta y/2$。按照处理2D均匀介质的相同步骤，可得

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta y}{2}\rho_{\mathrm{A}}\left(\frac{T(x_0+\Delta x,y_0)-T(x_0,y_0)}{\Delta x}+\frac{T(x_0-\Delta x,y_0)-T(x_0,y_0)}{\Delta x}\right)\\&+\frac{\Delta y}{2}\rho_{\mathrm{C}}\left(\frac{T(x_0+\Delta x,y_0)-T(x_0,y_0)}{\Delta x}+\frac{T(x_0-\Delta x,y_0)-T(x_0,y_0)}{\Delta x}\right)\\&+\Delta x\left(\rho_{\mathrm{A}}\frac{T(x_0,y_0+\Delta y)-T(x_0,y_0)}{\Delta y}+\rho_{\mathrm{C}}\frac{T(x_0,y_0-\Delta y)-T(x_0,y_0)}{\Delta y}\right)=0\end{aligned}\tag{5.49}$$

在式（5.49）两边除以$\Delta x\Delta y$后，可得

$$\begin{aligned}&\frac{(\rho_{\mathrm{A}}+\rho_{\mathrm{C}})}{2}\frac{T(x_0+\Delta x,y_0)-2T(x_0,y_0)+T(x_0-\Delta x,y_0)}{\Delta x^2}\\&+\frac{\rho_{\mathrm{A}}T(x_0,y_0+\Delta y)-(\rho_{\mathrm{A}}+\rho_{\mathrm{C}})T(x_0,y_0)+\rho_{\mathrm{C}}T(x_0,y_0-\Delta y)}{\Delta y^2}=0\end{aligned}\tag{5.50}$$

式（5.50）可以轻松扩展到任意分段均匀介质，热导率为常数，两个区域的边界平行于坐标轴的情况[19,20]。唯一的局限在于，有限差分节点必须位于交接面上。而泰勒级数法则没有这个局限性。

现在，我们对所有节点写出有限差分方程组：

$$\begin{bmatrix}-3&1&0&1&0&0&0&0&0\\1&-4&1&0&1&0&0&0&0\\0&1&-3&0&0&1&0&0&0\\a_2&0&0&-3&1&0&a_1&0&0\\0&a_2&0&1&-4&1&0&a_1&0\\0&0&a_2&0&1&-3&0&0&a_1\\0&0&0&1&0&0&-3&1&0\\0&0&0&0&1&0&1&-4&1\\0&0&0&0&0&1&0&1&-3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}T_1\\T_2\\T_3\\T_4\\T_5\\T_6\\T_7\\T_8\\T_9\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-T_{1,0}\\-T_{2,0}\\-T_{3,0}\\0\\0\\0\\-T_{1,4}\\-T_{2,4}\\-T_{3,4}\end{bmatrix}\tag{5.51}$$

其中

$$a_1=\frac{2\rho_{\mathrm{A}}}{\rho_{\mathrm{A}}+\rho_{\mathrm{C}}}\text{和 }a_2=\frac{2\rho_{\mathrm{C}}}{\rho_{\mathrm{A}}+\rho_{\mathrm{C}}}$$

再一次按照上一例中相同的步骤，求解方程（5.51），其结果见表5.7。

对比表 5.6 和表 5.7，我们可以看到，两种方法的结果相同。第三行的值等于解析解：

表 5.7　按图 5.26 中的节点计算图 5.24 问题的温度值

节点编号	温度/K	
	数值解	解析解
1	3.009484777517564e+002	3.009484777517565e+002
2	3.009484777517565e+002	3.009484777517565e+002
3	3.009484777517565e+002	3.009484777517565e+002
4	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
5	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
6	3.018969555035129e+002	3.018969555035129e+002
7	3.159484777517565e+002	3.159484777517565e+002
8	3.159484777517566e+002	3.159484777517565e+002
9	3.159484777517565e+002	3.159484777517565e+002

$$T(x,y)=\frac{60K}{H}\frac{1}{1+\rho_C/\rho_A}y+300K \qquad 0<y<\frac{H}{2}$$
$$T(x,y)=\frac{60K}{H}\frac{1}{1+\rho_A/\rho_C}y+30K\frac{\rho_A-\rho_C}{\rho_A+\rho_C}+300K \quad \frac{H}{2}<y<H \tag{5.52}$$

两个区间的分析解的数值解有 15 位的数值精度，采用双精度算法计算得到。结果显示，将一个所考虑区域分为子区域，可以用标准有限差分法计算。不过，节点复制会增加总节点数量。而采用全局法，节点数量少，但是需要采用非标准有限差分近似处理热容分布的不连续。该近似方法灵活度和精度都不如标准有限差分近似。

另一种基于子区域分割的更强大的方法是使用重叠网格[37]。在这种方法中，问题分为若干个子区域，而每个子区域内，有限差分近似可以进行非常高效率的运算。所有子区域重叠，所以在每个子区域的边界上，可以由相邻子区域内节点温度值进行内插，得到丢失的边界节点温度值。重叠网格分析复杂的非常规边界问题效率较高，并可以通过多核处理器计算机并行计算获得非常高的效率。

最后，我们还注意到，能量守恒法相对直接且易于处理热容连续变化区内出现阶梯不连续的情况，这种方法可在一定精度上近似计算。等热容分布不连续的材料，推导有限差分近似的更严格的方法，基于泰勒级数展开法[38]。

5.5 热源、边界条件和边界热阻

能量传递给晶格会造成光子器件发热。在半导体光电器件中，有多种机制会引起能量传递。当电子和空穴对辐射复合时，会释放光子，这一过程不会产生热量。但是，一些非辐射复合过程中，在释放光子的同时，多余的能量会传递给晶格。半导体器件中另一种发热的机制是自由载流子吸收。这一机制为，一个载流子与一个入射光子相互作用而跃迁到较高能级。然后这个载流子热运动到能带底，释放光子。另一种半导体光电器件中的重要热源，是电子空穴在晶格中流动产生的焦耳热。半导体器件中还存在热电子过程发热，如汤普森热。有趣的是，热电子效应还可以提供半导体激光器的一种内部冷却机制[39]。另外需要注意的是，半导体材料的晶格内的电子和空穴能级并不恒定不变。在很多与半导体有关的物理现象中，载流子温度会突然显著地高于晶格温度。但是由于其热容很低，载流子并不会显著影响晶格温度。更多有关半导体光电器件热源的信息，可以参考 Piprek[40] 及其参考文献列表。

在掺镧系离子的光子器件中，主要的热源来自于掺杂离子和主晶格的相互作用。当离子能级跃迁能量等于主晶格最大光子能量时，光致跃迁发生的概率要大于辐射跃迁。在这样的环境中，会出现一种特殊的非辐射跃迁，从而产生热量，请参看第 7 章。

在一些环境中，边界热阻对光子器件工作温度有不可忽略的影响。这一热阻，可能是热接点不良所致。在一个包含很多层不同材料的半导体器件中，边界热阻会阻碍热传导的过程，从而导致半导体交界面周围出现阶梯状温度差[41]。处理边界热阻的相关知识，可参考热传导建模的相关教科书[19]。但是，当考虑光子反射时，就必须要计算出实际热阻值[41]。

最后，我们还注意到，光子器件温度分布的计算与假设的边界条件有关。对光纤的情况，我们假设热量会通过热对流从光纤中耗散[13]。激光器二极管的情况要更复杂些。实验结果显示，器件内的热量大部分会通过衬底 - 热沉的热接点流走。少部分热量会通过表面辐射和热对流耗散掉[8]。后面两种热耗散过程的处理并不直观。最简单的方法是忽略掉这两种过程，假设上表面是纽曼边界条件。但是，试验发现这一边界条件并不时刻有效，而狄利克雷边界条件可以更精确地预测温度分布。我们还注意到，在边界条件出现不连续的情况下，出现固有奇异性的可能性。在对激光器二极管进行建模时会很容易出现这种情况，狄利克雷边界和纽曼边界间会出现突变。这种不连续会造成温度分布的奇异性。而奇异性的存在反过来防止高阶有限差分网格的收敛快于标准五点模板。更详细的讨论可参考 Ames[43] 的摘要。

参 考 文 献

1. Bejan, A., *Heat Transfer*. 1993, New York: Wiley.
2. Ochalski, T.J., et al., Thermoreflectance and micro-Raman measurements of the temperature distributions in broad contact laser diodes. *Optica Applicata*, 2005. 35(3): p. 479–484.
3. Siegal, B., Measurement of junction temperature confirms package thermal design. *Laser Focus World*, 2003. (11).
4. Collins, R.E., *Mathematical Methods for Physicists and Engineers*. 1999, New York: Dover Publications Inc.
5. Carslaw, H.S. and J.C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*. 1959, London: Oxford University Press.
6. Moosburger, R., et al., Digital optical switch based on 'oversized' polymer rib waveguides. *Electronics Letters*, 1996. 32(6): p. 544–545.
7. Joyce, W.B. and R.W. Dixon, Thermal resistance of heterostructure lasers. *Journal of Applied Physics*, 1975. 46(2): p. 855–862.
8. Pipe, K.P. and R.J. Ram, Comprehensive heat exchange model for a semiconductor laser diode. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2003. 15(4): p. 504–506.
9. Ronnie, T.J.W., Advances in High-Power Laser Diode Packaging, In *Semiconductor Laser Diode Technology and Applications*, D.S. Patil, Editor. 1999, www.intechopen.com.
10. Biwojno, K., et al., Thermal models for silicon-on insulator-based optical circuits. *Optica Applicata*, 2004. 34(2): p. 149–161.
11. Zhuo, C., et al., The thermal effect in a grazing-incidence slab laser with the novel composite cooling method. *Optical and Quantum Electronics*, 2009. 41(1): p. 27–38.
12. Vuksic, J.A., et al., Numerical Optimization of the single fundamental mode output from a surface modified vertical-cavity surface-emitting laser. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2001. 37(1): p. 108–117.
13. Brown, D.C. and H.J. Hoffman, Thermal, stress, and thermo-optic effects in high average power double-clad silica fiber lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2001. 37(2): p. 207–217.
14. Nakwaski, W. and M. Osinski, On the thermal resistance of vertical-cavity surface-emitting lasers. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29(9): p. 883–892.
15. Kotake, S. and K. Hijikata, *Numerical Simulations of Heat Transfer and Fluid Flow on a Personal Computer*. 1993, Amsterdam: Elsevier.
16. Shih, T.M., *Numerical Heat Transfer*. 1984, New York: Hemisphere Publishing Corporation.
17. Minkowycz, W.J., et al., *Handbook of Numerical Heat Transfer*. 2006, New York: John Wiley & Sons.
18. Bekker, A.A., *The Boundary Element Method in Engineering: A Complete Course*. 1992, London: McGraw-Hill.
19. Croft, D.R., Stone, J.A.R., *Heat Transfer Calculations Using Finite Difference Equations*. 1977, Sheffield: PAVIC Publications, Sheffield City Polytechnic.
20. Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. 1980, New York: Hemisphere Publishing Corporation.
21. Reddy, J.N., Gartling, D.K., *The Finite Element Method in Heat Transfer and Fluid Dynamics*. 2000: Taylor & Francis.
22. Szymanski, M., et al., Two-dimensional model of heat flow in broad-area laser diode mounted to a non-ideal heat sink. *Journal of Physics D-Applied Physics*, 2007. 40(3): p. 924–929.
23. Lee, C.C. and D.H. Chien, The effect of bonding wires on longitudinal temperature profiles of laser diodes. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(8): p. 1847–1852.

24. Mukherjee, J. and J.G. McInerney, Electrothermal analysis of CW high-power broad-area laser diodes: A comparison between 2-D and 3-D Modeling. *Ieee Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2007. 13(5): p. 1180–1187.
25. Smith, G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Method*. 1988, Oxford: Oxford University Press.
26. Saad, Y., *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd edition. 2000, Philadelphia: SIAM.
27. Barret, R., et al., *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. 1994, Philadelphia: SIAM.
28. Strikwerda, J.C., *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. 2004, Philadelphia: SIAM.
29. Spiegel, M.R., *Calculus of Finite Differences and Difference Equations*. 1994: McGraw-Hill, Inc.
30. Gibou, F. and R. Fedkiw, A fourth order accurate discretisation for Laplace and heat equations on arbitrary domains with applications to the Stefan problem. *Journal of Computational Physics*, 2005. 202(2): p. 577–601.
31. Collatz, L., *The Numerical Treatment of Differential Equations*. 1960, Berlin: Springer-Verlag.
32. Pozirikidis, C., *Numerical Computation in Science and Engineering*. 1998, Oxford: Oxford University Press.
33. Rosloniec, S., *Fundamental Numerical Methods for Electrical Engineering*. 2008, Berlin: Springer.
34. LeVeque, R.J. and Z. Li, The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal Numerical Analysis*, 1994. 31(4): p. 1019–1044.
35. Jomaa, Z. and C. Macaskill, The embedded finite difference method for the Poisson equation in a domain with irregular boundary and Dirichlet boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 2005. 202(1): p. 488–506.
36. Johansen, H. and P. Colella, A cartesian grid embedded boundary method for Poisson's equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 1998. 147(1): p. 60–85.
37. Sherer, S.E. and J.N. Scott, High-order compact finite-difference methods on general overset grids. *Journal of Computational Physics*, 2005. 210(2): p. 459–496.
38. Sujecki, S., Extended Taylor series and interpolation of physically meaningful functions. *Optical and Quantum Electronics*, 2013. 45(1): p. 53–66.
39. Pipe, K.P., R.J. Ram, and A. Shakouri, Internal cooling in semiconductor laser diode. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2002. 14(4): p. 453–455.
40. Piprek, J., *Semiconductor Optoelectronic Devices Introduction to Physics and Simulation*. 2003, San Diego: Academic Press.
41. MacKenzie, R., et al., An investigation of thermal boundary resistance in 1.3 micrometer edge-emitting dilute nitride quantum well laser diodes. *Physica Status Solidi C*, 2008. 5(2): p. 485–489.
42. Szymanski, M., Two-dimensional model of heat flow in broad-area laser diode: Discussion of the upper boundary condition. *Microelectronics Journal*, 2007. 38(6–7): p. 771–776.
43. Ames, W.F., *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 1977, New York: Academic Press.

第 6 章　半导体光子器件中的电流

半导体光子器件，如激光器二极管（Laser Diode，LD）、发光二极管（Light Emitting Diode，LED）[1] 以及光电二极管（Photodiode，PD）[2,3] 广泛应用于通信、医学和制造工业中。这些器件的优点包括器件结构紧凑、成本低、可靠性高，易于使用等。对 LD、LED 和 PD 进行电流建模，对深入了解这些器件工作的物理过程很重要。

在本章中，我们将介绍半导体器件内的电流建模。第 8 章将会将这部分理论实际应用于半导体激光器建模。为了轻松地理解这些知识，我们将使用 MATLAB 编程环境作为理论实现的软件平台。我们将在本章推导漂移扩散方程。然后我们将会详细讲解 1 维（1D）漂移扩散方程的数值解法，求解无偏置 p－n 结。在随后章节中，我们将在“无偏置 p－n 结中的电势分布”和“偏置 p－n 结中的电势和准费米能级分布”小节中讨论数值解法的应用，用于分析光子半导体器件。如前面章节所述，很多参考书都专门讨论了半导体器件内的载流子输运数值模型[4-6]。因此在本章中，我们只关注漂移扩散方程数值解对理解和开发第 8 章中软件工具有关的一些方面。

6.1　引言

半导体材料中的原子相对间距较小。这些原子的价电子相互作用，形成两个间距较近的能级结构：价带和导带。半导体理论假设，只有这两个能带中的电子参与形成电流，而其他电子则束缚于原子核。在 0K 时，价带充满电子而导带为空，因此，半导体内无电流通过。而在温度较高时，热运动会使电子从价带跃迁到导带，从而使电子可以移动。因此半导体变得可以导电。跃迁的电子在价带（空穴）留下一个空能态，所以价带电子也可以形成电流。

在大部分电流建模和设计工具中，用漂移－扩散方程研究半导体器件内的电流[7]。由波尔兹曼转移方程可以推导出漂移－扩散方程。还可以通过物理现象加上麦克斯韦方程的辅助，推导出漂移－扩散方程。我们下面讲解后一种方法。我们首先推导泊松方程，然后用其推导电流连续性方程。

对半导体材料，麦克斯韦方程有如下形式：

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r},t)}{\partial t} \tag{6.1a}$$

$$\nabla \times \vec{H}(\vec{r},t) = \frac{\partial \vec{D}(\vec{r},t)}{\partial t} + \vec{J} \tag{6.1b}$$

方程（6.1）满足散度条件：

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \tag{6.2a}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \tag{6.2b}$$

此外，电场和电通量矢量之间的关系为

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} [1 + \chi(\vec{r},t-\tau)] \vec{E}(\vec{r},t) \mathrm{d}\tau \tag{6.3a}$$

式中，ε_0 为自由空间介电常数；χ 为电极化率。对静态场，方程（6.3a）化简为

$$\vec{D}(\vec{r}) = \varepsilon \vec{E}(\vec{r}) \tag{6.3b}$$

式中，ε 为半导体材料的静态介电常数

为了推导泊松方程，我们首先对方程（6.1a）做静态近似化简：

$$\nabla \times \vec{E}(\vec{r}) = 0 \tag{6.4}$$

表明，电场可以由一个标量势 φ 表示：

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla \varphi \tag{6.5}$$

将式（6.5）带入式（6.2a），并用式（6.3b）得到：

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = -\rho \tag{6.6}$$

对均匀介质，方程（6.6）化简为泊松方程。

理论上，方程（6.6）只能用于静态情况。不过，在 Collins[5] 中，在一系列约束条件下，可以在时变电磁场应用方程（6.6）。

对一个半导体材料，方程（6.6）右侧的电荷密度 ρ 可以表示成和的形式：

$$\rho = q(p - n - N_A + N_D) \tag{6.7}$$

式中，q 为单位电荷；n 和 p 分别为电子和空穴浓度。N_A 和 N_D 分别为施主和受主浓度。

为了得到电流连续性方程，可计算式（6.1b）的散度：

$$\nabla \cdot \nabla \times \vec{H}(\vec{r},t) = \frac{\partial(\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r},t))}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \tag{6.8}$$

将式（6.2a）代入式（6.8），得到电流连续性方程：

$$\nabla \cdot \vec{J} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \tag{6.9}$$

对比方程（6.9）和方程（5.2）可以看到，方程（6.9）是另外一个和通量变化率有关的方程。方程（6.9）是有关电荷通量（电流密度）和电荷密度变化的方程，其实质上，是电荷守恒定律的数学表示，即在单位时间内，一个物体内的电荷产生量应该等于流进流出物体表面的电荷净通量。因为电荷和空穴还满足粒子数守恒定律，我们可以立刻写出如下方程：

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n \tag{6.10a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p \tag{6.10b}$$

式中，$\vec{J}_n$ 和 $\vec{J}_p$ 分别为电子和空穴电流密度。

表示电子 - 空穴对的产生和复合过程的方程（6.1），与表示发热项的方程（5.2）有相似的形式。电子和空穴的电流连续性方程的最终形式为

$$\frac{\partial n}{\partial t}=\frac{1}{q}\nabla\cdot\vec{J}_n-R \tag{6.11a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}=-\frac{1}{q}\nabla\cdot\vec{J}_p-R \tag{6.11b}$$

式中，R 为净电子空穴对复合 - 产生率。R 为正值时对应了复合（即式中的电子空穴浓度减小），而负值对应了电子 - 空穴对生成。因此，方程（6.11）中的电子 - 空穴对复合 - 产生项和方程（5.2）中的发热项作用相同。

如果电流密度与载流子浓度，电势的方程，方程（6.11）和方程（6.6）构成自洽方程组，则可以求解电势分布和载流子浓度（或者准费米能级）。由波尔兹曼方程可以得到电流密度合适的表达式[8,9]：

$$\vec{J}_n=q\mu_n n\nabla E_{Fn}-L_n\nabla T \tag{6.12a}$$

$$\vec{J}_p=q\mu_p p\nabla E_{Fp}-L_p\nabla T \tag{6.12b}$$

式中，μ_n 和 μ_p 分别为电子和空穴迁移率；L_n 和 L_p 为 k 空间积分定义的转移系数[9]；E_{Fn}和 E_{Fp}分别为电子和空穴的准费米能级。对温度分布恒定的均匀介质，方程（6.12a）和（6.12b）化简为

$$\vec{J}_n=-q\mu_n n\nabla\varphi_n \tag{6.13a}$$

$$\vec{J}_p=-q\mu_p p\nabla\varphi_p \tag{6.13b}$$

方程（6.13）可以改写为熟悉的漂移 - 扩散方程形式[9]：

$$\vec{J}_n=q\mu_n n\vec{E}+qD_n\nabla n \tag{6.14a}$$

$$\vec{J}_p=q\mu_p n\vec{E}+qD_p\nabla p \tag{6.14b}$$

由方程（6.14），应用波尔兹曼统计近似，可以简单地得到方程（6.13）[10]。不过，因为现在载流子和费米能级的式子只是变量在数学上的代换，所以还是无法解释波尔兹曼统计造成方程（6.13）和方程（6.14）计算精度下降的问题（参考文献［5］的 136 页）。方程（6.14）的优点在于可以从物理现象推导出方程式（如参考文献［11］），所以，可以凭只觉理解载流子输运的过程。

通过积分可以得到与准费米能级与方程（6.13）和方程（6.14）中的电子和空穴密度之间的关系：

$$n\doteq\int_{E_c}^{\infty}\rho_c(E)f_n(E)\,\mathrm{d}E \tag{6.15a}$$

$$p=\int_{-\infty}^{E_v}\rho_v(E)f_p(E)\,\mathrm{d}E \tag{6.15b}$$

式中，ρ_c 和 ρ_v 分别为导带和价带的状态函数；E_c 为导带底的能级；E_v 为价带顶

的能级。f_p 和 f_n 为费米分布函数：

$$f_n(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_{Fn}}{kT}\right)} \tag{6.16a}$$

$$f_p(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_{Fp}-E}{kT}\right)} \tag{6.16b}$$

最后，一般在仿真中，会使用准费米势 φ_n 和 φ_p 代替准费米能级 E_{Fn}和 E_{Fp}：

$$E_{Fn}=-q\varphi_n$$

$$E_{Fp}=-q\varphi_p$$

因此，结合方程（6.13）给出的电流密度，求解方程（6.6）和方程（6.11），同时用方程（6.15）结合载流子浓度和准费米能级，可得出电势和准费米能级为未知数的表达式，这是处理这一问题的一种主流的方法。还可以通过设其他量为未知数求解扩散漂移方程。如应用 Slootboom 变量的方法[12]以及 Mock 流电位法[13-15]。选择何种特别的变量的优点讨论可以参考文献［10，16］，所以我们在这里不再赘述。当对半导体光子器件进行建模时，选择电势和准费米能级推导表达式比较合适。我们因此使用这个公式，并在随后两节中详细讨论它的应用。

对比热传导公式，漂移扩散方程很难得到解析解。最新的有关 p-n 结漂移扩散方程近似解析解的研究，颗参考 Laux 和 Hess[17]。Mock[14(pp. 90-91)]和 Burgler 等人[18]给出了一个准确的解析解。文献［19-22］中还有适合于其他半导体器件的解析解。不过，对于所有实际设计，数值方法不可或缺，应用的数值方法主要有两种：有限差分法（FDM）和有限元法（FEM）。在这里，我们只讨论 FDM。有关 FEM 用于半导体器件建模的信息，可参考 Collins[5]，Bank 等人[16]和 Buturla 等人的文献[23]，以及最新的 Bochev 等人的文献[24]。为了不影响理解接下来"无偏置 p-n 结中的电势分布"和"无偏置 p-n 结中的电势和准费米能级分布"小节中的重要内容，我们只推导均匀 FD 网格。

6.2 无偏置 p-n 结中的电势分布

计算无偏置半导体器件中的电势分布，一般是计算偏置下电势和载流子密度的第一步，这一步很重要，因为求解方程（6.6）和方程（6.11）的迭代算法的收敛性与初始条件紧密相关。在大偏置电压条件下找到合适的初始条件（可以使算法在迭代很少次数后就收敛）较难。因此，解决计算方程（6.6）和方程（6.11）的一个办法是首先计算零偏，然后在逐步升高偏置电压直到逼近工作电压[25]。当前步的计算都是以前一部计算的结果作为初始条件的。

在无偏置情况下，准费米电势的空间分布恒定不变。因此，方程（6.11）与

方程（6.6）无关，我们只需要求解方程（6.6）得到电势分布。当电势分布已知时，就可以画出整个能带图。

为了求解方程（6.6），需要对n和p代入方程（6.15）。这会引入两个新的未知数，它们分别为导带能级和价带能级：E_c 和 E_v。所以，在求方程（6.6）的数值解之前，我们需要推导出价带能级和导带能级的值代入方程（6.15），它们可以用电势和如下半导体材料参数表示：禁带宽度和电子亲和能。所以未知数的数量减少到一个：电势。

在p型和n型半导体中，E_c 和 E_v 为常数，在能带和电子亲和能已知的情况下，可以轻松确定这两个常数的值（见图6.1）。

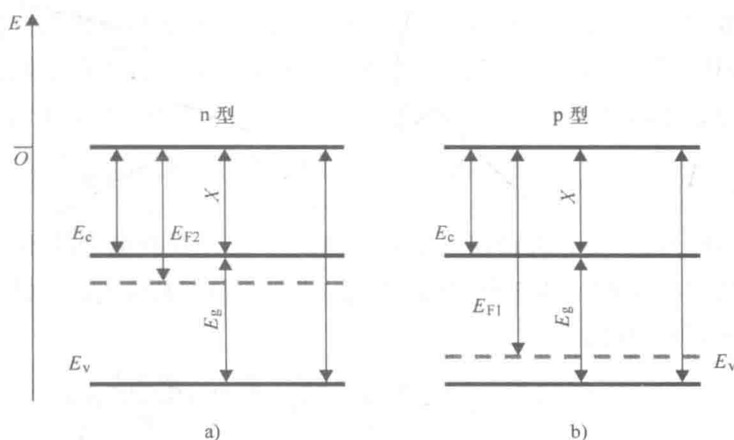


图6.1　能级示意图
a）n型半导体　b）p型半导体

另一方面，在p－n结中，E_c 和 E_v 是位置的函数，而其分布值由在求解方程（6.6）之后才可知。但是，导带和价带能级与电势有关。我们首先需要选择未知的电势参考能级，参考能级在各种文献中表述各不相同。在本章中，我们将参考能级和构成p－n结的n型半导体的真空能级挂钩。在选择参考能级之后，真空能级等于 $-q\varphi$（见图6.2）。当选择电势的参考能级后，价带

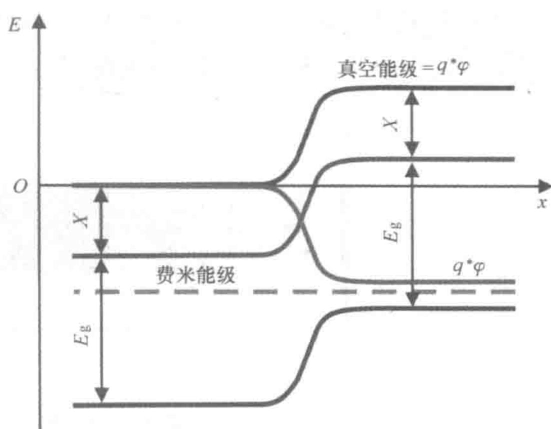


图6.2　p－n同质结的能级示意图，电势参考能级为n型半导体的真空能级（见本书封三彩图）

顶和导带底的位置可以用电势、禁带宽度 E_g，和电子亲和能 X 表示。按图 6.2，有

$$E_v = -q\varphi - X - E_g \tag{6.17a}$$

$$E_c = -q\varphi - X \tag{6.17b}$$

结合方程（6.17）和方程（6.14），方程（6.6）的唯一的未知数是电势。所以，我们现在讨论方程（6.6）的数值解法。我们详细讨论 1D 情况下方程（6.6）的解。如果我们选择 x 为空间变量，则偏微分方程（6.6）可以化简为常微分方程：

$$\frac{d}{dx}\left(\varepsilon \frac{d\varphi}{dx}\right) = -\rho \tag{6.18}$$

首先，我们将求解常微分方程（6.18）转化为求解非线性代数方程组。为此我们使用 FDM。我们引入一组节点 x_i（见图 6.3），并使用第 5 章中描述的推导均匀介质内热流建模的有限差分近似方法。于是对每个节点 x_i，有如下方程：

$$EQ_i(\varphi_{i-1},\varphi_i,\varphi_{i+1}) = \frac{\varepsilon_L\varphi_{i-1} - (\varepsilon_L + \varepsilon_R)\varphi_i + \varepsilon_R\varphi_{i+1}}{\Delta x^2} + \rho(x_i) = 0 \tag{6.19a}$$

在方程（6.19a）中，假设在有限差分网格节点 x_i 存在电介质不连续。ε_L 表示不连续点的“左”侧，即在 FD 网格点 x_{i-1} 处。而 ε_R 表示 x_{i+1} 一侧。对均匀介质，方程（6.19a）化简为

$$EQ_i(\varphi_{i-1},\varphi_i,\varphi_{i+1}) = \frac{\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1}}{\Delta x^2} + \frac{\rho(x_i)}{\varepsilon} = 0 \tag{6.19b}$$

在 $x = -L_n$ 处，我们引入边界条件 $\varphi = 0$，在 $x = L_p$ 处（见图 6.3），我们设电势等于内建（或电势垒）电势：$\varphi = -V_{BARRIER}$。我们注意这样的边界条件包含了电势参考能级。将每个 FD 节点的方程（6.19）联立，并考虑边界条件，可以得到一个非线性代数方程组，其中方程数量等于未知数数量，即各 FD 节点的电势值 φ_i。该方程组可以用牛顿－拉富生法求解[26]：

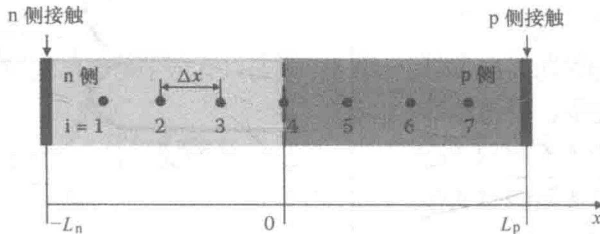


图 6.3 p－n 结的节点网格点分布示意图一例

$$\text{Jacobian} * \varphi^{NEW} = -EQ(\varphi^{OLD}) + \text{Jacobian} * \varphi^{OLD} \tag{6.20}$$

式中，φ^{NEW}为牛顿 - 拉富生法中用于存储采样点 φ_i 的向量；而 φ^{OLD}存储了采样点 φ_i 的初始值。而 Jacobian 矩阵为

$$\text{Jacobian}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial EQ_1}{\partial\varphi_1} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_1}{\partial\varphi_i} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_1}{\partial\varphi_{\mathrm{N}}}\\ \vdots & & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial EQ_i}{\partial\varphi_1} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_i}{\partial\varphi_i} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_i}{\partial\varphi_{\mathrm{N}}}\\ \vdots & & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial EQ_{\mathrm{N}}}{\partial\varphi_1} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_{\mathrm{N}}}{\partial\varphi_i} & \cdots & \dfrac{\partial EQ_{\mathrm{N}}}{\partial\varphi_{\mathrm{N}}}\end{bmatrix}\tag{6.21}$$

当 φ^{NEW}替代 φ^{OLD}，迭代算法收敛求解方程（6.18），需要选择初始条件尽量靠近方程的解[26]。算法 6.1 总结了这个过程。

在用 MATALB 实现算法 6.1 之前，需要对算法做两点注释。首先，方程（6.6）得到的非线性代数方程组，虽然是应用 FDM 得到的，但还是可能会出现伪解。

算法 6.1　有限差分法计算无偏同质结的电势分布

1. 开始；
2. 选择 Δx 和采样点；
3. 设置初始条件 φ^{OLD}；
4. 由方程（6.20）计算 φ^{NEW}；
5. 如果 $|\varphi^{\mathrm{OLD}}-\varphi^{\mathrm{NEW}}|>$余差，则 $\varphi^{\mathrm{OLD}}=\varphi^{\mathrm{NEW}}$，跳转到步骤 4；
6. 停止。

避免计算伪解而不是有物理意义解的最好方法，是选择初始条件尽量靠近物理解。其次，积分式（6.15）无法解析估计（见参考文献［11］），这意味着对每个节点 x_i，都需要进行数值估计。这会造成庞大的数值计算开销。因此，实际的算法对积分式（6.15）做解析近似。这里，我们使用波尔兹曼统计近似，它广泛用于光子器件的体半导体材料区仿真中。这种近似不会影响数值方法的通用性，因为波尔兹曼统计可以理解为是一种简单的数学变量代换（Collins[5] 的第 5 章）。应用波尔兹曼统计近似，由式（6.15）可得到：

$$p=N_{\mathrm{v}}\exp\left(\frac{E_{\mathrm{v}}-E_{\mathrm{Fp}}}{kT}\right)\tag{6.22a}$$

$$n=N_{\mathrm{c}}\exp\left(\frac{E_{\mathrm{Fn}}-E_{\mathrm{c}}}{kT}\right)\tag{6.22b}$$

式中，N_{c} 和 N_{v} 分别为导带和价带的有效能态密度。将式（6.17）代入能带表达

式，表示式（6.22）中的参数，可以得到下面的空穴和电子浓度的解析表达式：

$$p = N_v \exp\left(\frac{(-q\varphi - X - E_g) + q\varphi_p}{kT}\right) \tag{6.22c}$$

$$n = N_c \exp\left(\frac{-q\varphi_n - (-q\varphi - X)}{kT}\right) \tag{6.22d}$$

在式（6.22c）和式（6.22d）中，两个准费米能级相等，且为常数。所以可以将它们视为一个仿真参数。由图 6.2，可以得到 p - n 结中 n 型半导体材料中，用电势参考能级表示的准费米能级，为

$$q\varphi_n = q\varphi_p = E_c + kT\ln\left(\frac{n}{N_c}\right) \tag{6.23}$$

为了评估式（6.23），需要知道 n 型半导体的电子浓度。由电中性条件和质量定律（在波尔兹曼统计近似中使用），可以得到均匀半导体介质中的载流子浓度：

$$n + N_A = p + N_D \tag{6.24a}$$

$$np = n_i^2 \tag{6.24b}$$

式中，n_i 为本征载流子浓度[11]。由式（6.24），可以得到用施主和本征载流子浓度表示的电子和空穴浓度：

$$n = \frac{N_D - N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2} \tag{6.25a}$$

$$p = \frac{N_A - N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} \tag{6.25b}$$

当施主浓度较高时，式（6.25）可近似为

$$n = N_D \tag{6.26a}$$

$$p = \frac{n_i^2}{N_D} \tag{6.26b}$$

最后，我们可以由 p 型和 n 型均匀半导体介质的费米能级差计算出内建电势。

算法 6.1 应用波尔兹曼统计近似的 MATLAB 代码如下：

```
% program calculates the electric potential in unbiased pn
% homojunction
% version 15.08.13,
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e
% initial constants
I = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;
c = 2.998e+2;% speed of light in free space [mi/ps]
q = 1.602e-19;% elemental charge [C]
```

```
h_s = 6.62606885e-34;% Planck's constant [J*ps]
kB = 1.3807e-23;% Boltzman's constant [J/K]
T = 300.;% temperature [K]
kT = kB*T/q;% kT [eV]
UT = kB*T/q;% UT thermal potential [V]
eps0 = 8.854e-18;% vacum permittivity [F/mi]
m0= 9.11e-31;% electron mass [kg]

% input semiconductor parameters (GaAs)
mc = 0.067;% relative electron mass
mv = 0.37736;% relative hole mass
%(electrons) effective density of states [1/mi3]:
Nc = 2*sqrt((2*pi*mc*m0*kB*T/(h_s*h_s))^3)*1.e-18
%(holes) effective density of states [1/mi3]:
Nv = 2*sqrt((2*pi*mv*m0*kB*T/(h_s*h_s))^3)*1.e-18

Wg = 1.424;% bandgap [eV]
X = 4.07;% affinity [eV]
Wc = -4.07;% conduction band edge [eV] measured
% with respect to vacuum level
Wv = -5.494;% valence band edge [eV] measured
% with respect to vacuum level
eps = 13.18;% relative dielectric constant

% n side
ND = 1e+4;% donor concentration [1/mi3]
thick_n = 1.0;% n side thickness [mi]
% Fermi level at no bias measured with respect
% to vac level on n side [eV]:
WFeq_n = Wc+kT*log(ND/Nc)

% p side (the unchanged params are not redefined)
NA = 1e+4;% acceptor concentration [1/mi3]
thick_p = 1.0;% p side thickness [mi]
% Fermi level at no bias measured with respect
% to vac level on n side [eV]:
WFeq_p = Wv-kT*log(NA/Nv)
% Barrier potential (can be calculated directly
% since energy is in eV):
VBarrier = WFeq_n-WFeq_p

Up = (-X-Wg-WFeq_n);
Un = (X+WFeq_n);

% calculation parameters
thick = (thick_n+thick_p);% device length
N_points = 1000;% number of points on L
dx = thick/(N_points);% step dx [Li]

% vector initialisation
EQ = zeros(N_points,1);
```

```
Vi = zeros(N_points,1);
left_diag = zeros(N_points,1);
right_diag = zeros(N_points,1);
KN = zeros(N_points,1);
ue = ones(N_points+2,1);

% initial voltage distribution
for i = 1:N_points/2
    Vi(i) = 0.0;
    Vi(i+N_points/2) = -VBarrier;
end
ue(2:N_points+1) = Vi;
ue(1) = 0;
ue(N_points+2) = -VBarrier;

% setting up vectors for equations
for i = 1:N_points/2
    KN(i) = ND;
    KN(i+N_points/2) = -NA;
end
w = log(abs(KN(1)))


% setting off diagonals of Jacobian
for i = 1:N_points
    left_diag(i) = -1.0/(dx*dx);
    right_diag(i) = -1.0/(dx*dx);
end

for j = 1:10%main loop start
% setting main diagonal of Jacobian
main_diag = 2.0/(dx*dx)+(1/UT)*...
(Nv*exp((Up-Vi)/UT)+Nc*exp((Un+Vi)/UT))*q/(eps*eps0);
Jacobian = spdiags([left_diag main_diag right_diag],...
-1:1,N_points,N_points);

% calculating the function value at Vi
for i = 2:N_points+1
EQ(i-1) = -(q/(eps*eps0))*(Nv*exp((Up-ue(i))/UT)-...
Nc*exp((Un+ue(i))/UT)+...
KN(i-1))+(2.0*ue(i)-ue(i-1)-ue(i+1))/(dx*dx);
end

Right_side = -EQ+Jacobian*Vi;
Vi = Jacobian\Right_side;
res = ue(2:N_points+1)-Vi;
res'*res
ue(2:N_points+1) = Vi;

end %main loop stop
```

我们注意到，因为程序快速收敛，所以若干次迭代就可以得到精确的结果，所以上面的代码中没有余值检查。最后一个重要的注释是，我们需要注意在开发代码

执行算法 6.1 时保持单位一致。

图 6.4 所示为 MATLAB 代码计算 GaAs 同质结在 $T=300\text{K}$ 时的电势分布。建模参数见表 6.1。两侧的施主浓度均为 $10^{16}/\text{cm}^3$。作为对比，我们在图 6.5 中给出了当 n 侧施主浓度增加到 $10^{17}/\text{cm}^3$ 时的电势分布。如我们预期的，n 侧的过渡区变得更窄，能带弯曲变得更陡峭，而结显著偏向一侧。两个仿真中，都使用 1000 个 FD 节点。

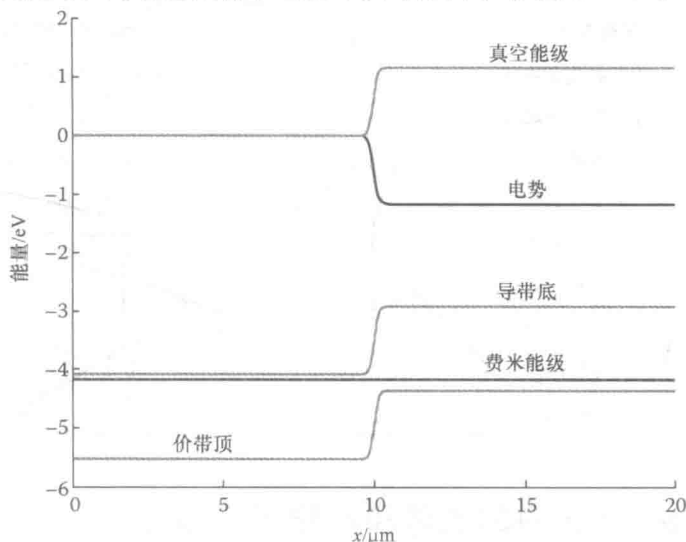


图 6.4　计算得到的 GaAs 同质结的能带图。结两侧的施主浓度均为 $10^{16}/\text{cm}^3$
（仿真使用一千个 FD 节点，其他建模参数见表 6.1）

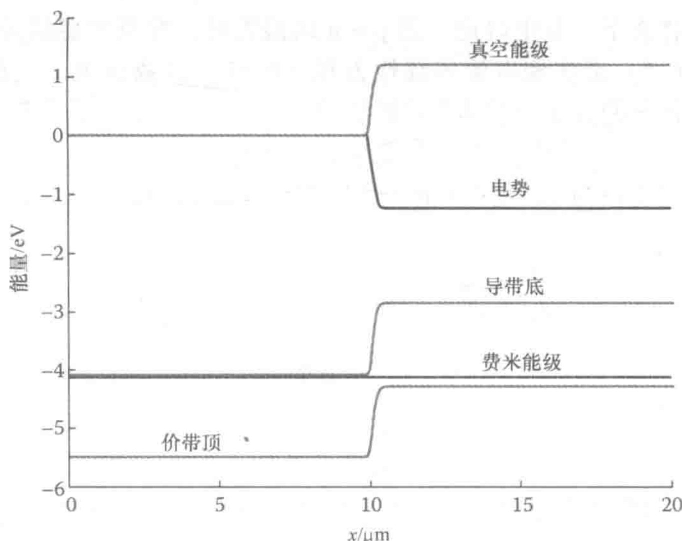


图 6.5　计算得到的 GaAs 同质结的能带图
（n 侧的施主浓度均为 $10^{17}/\text{cm}^3$，p 侧施主浓度为 $10^{16}/\text{cm}^3$。仿真使用一千个 FD 节点，其他建模参数见表 6.1）

表 6.1 GaAs 同质结在 $T=300$K 的仿真参数

参数	值
禁带宽度	$E_g=1.424$eV
电子亲和能	X = 4.07eV
等效重空穴质量	$m_v=0.377/m_0$
等效电子质量	$m_c=0.067/m_0$
本征载流子浓度	$n_i=1.74\times10^{12}$ 1/m^3
导带等效态密度	$N_c=4.35\times10^{23}$ 1/m^3
价带等效态密度	$N_v=5.87\times10^{24}$ 1/m^3
电子迁移率	$\mu_e=4000$cm^2/(Vs)
空穴迁移率	$\mu_h=400$cm^2/(Vs)
SRH 复合寿命	$\tau=10$ps
相对介电常数	$\varepsilon=13.18$
n 侧宽度	$L_n=10\mu$m
p 侧宽度	$L_p=10\mu$m

6.3 偏置 p－n 结中的电势和准费米能级分布

在本节中，我们将用“无偏置 p－n 结的电势分布”中的 FDM 分析偏置 p－n 结。同样，为了使要点更清晰，我们考虑 1D 的偏置 p－n 结。有关 FDM 进行多维分析的内容，将在下一节中讨论。当 p－n 结偏置时，准费米能级是位置的函数。所以，方程（6.6）无法和电流连续性方程（6.11）分离求解。虽然如此，本质上，求解偏置情况的方法与求解无偏置结的方法相同。即，首先将微分方程转换为非线性代数方程，然后再用牛顿－拉富生法计算解。

如果取空间变量为 x，在 1D 情况中，方程（6.6）和方程（6.11）可以化简为如下方程式：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\varepsilon\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)+q(\mathrm{p}-\mathrm{n}+N_\mathrm{D}-N_\mathrm{A})=0 \tag{6.27a}$$

$$\frac{\mathrm{d}J_\mathrm{nx}}{\mathrm{d}x}=R$$

$$\frac{\mathrm{d}J_\mathrm{px}}{\mathrm{d}x}=-R \tag{6.27b}$$

式中，J_nx和 J_px分别为电子和空穴电流密度向量的 x 分量。电流密度可以用准费米势表示：

$$J_\mathrm{nx}=-q\mu_\mathrm{n}n\frac{\mathrm{d}\varphi_\mathrm{n}}{\mathrm{d}x}$$

$$J_{px} = -q\mu_p p \frac{d\varphi_p}{dx} \tag{6.28}$$

或者用载流子浓度表示：

$$J_{nx} = q\mu_n n E_x + qD_n \frac{dn}{dx}$$

$$J_{px} = q\mu_p n E_x - qD_p \frac{dn}{dx} \tag{6.29}$$

此时，需要注意到，当研究跨越同质结的载流子输运时，需要考虑结掺杂情况、掺杂组分、偏置电压以及热电子激发[4,27-29]或隧道电流[30]之间的关系。

再一次用解析近似积分式（6.15）。当器件处于偏置状态时，玻尔兹曼近似值在中等偏置电压情况下有效。对大偏置电压，需要使用其他近似。文献 [5，31] 中有这个问题的讨论。Purbo 等人的文献[32]中，有一个关于应用解析近似，研究半导体建模中的费米 - 狄拉克分布的帮助性的指导。在束缚载流子的量子阱区域内，积分式（6.15）可以有解析估计。被束缚的三维（3D）载流子之间配对可以用捕捉 - 逃逸模型描述[33]。这里，为了简化器件，我们采用玻尔兹曼分布。

将式（6.28a）带入式（6.27b），并用玻尔兹曼分布，可得到

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dx}\left(\varepsilon \dfrac{d\phi}{dx}\right) + q(p - n + N_D - N_A) = 0 = 0 \\ \dfrac{d}{dx}\left\{\mu_n n \dfrac{d\varphi_n}{dx}\right\} = -R \\ \dfrac{d}{dx}\left\{\mu_p p \dfrac{d\varphi_p}{dx}\right\} = R \end{cases} \tag{6.30}$$

式中，p 和 n 分别由式（6.18a）和式（6.18b）给出。在进一步处理之前，我们需要用位势表示载流子浓度，这样未知数就只剩下三个，另外两个是电势和准费米能级。为此，我们需要首先定义电势参考能级。同样可以用上一节中的真空能级。不过，在本节中，我们将用另一种流行的选择，使用本征半导体费米能级 E_i[5]。为了定义 E_i，我们将 $E_i - E_i$ 带入式（6.22a）和式（6.22b），得到

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{Fp}}{kT}\right) \tag{6.31a}$$

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{kT}\right) \tag{6.31b}$$

在玻尔兹曼统计近似下，n_i 定义为

$$n_i = \sqrt{N_v N_c} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \tag{6.32}$$

由此方程，可得到本征能级为

$$N_c \exp\left(\frac{E_c - E_i}{kT}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_i - E_v}{kT}\right) \tag{6.33}$$

Collins[5]中用费米分布计算了本征能级。现在我们用本征能级表示电势（见图6.6），即

$$E_{\mathrm{i}} = -q\varphi \tag{6.34}$$

方程（6.34）适用于同质结。在异质结中，E_{i} 为分段连续函数，需要从每个p－n结的同质子区域中确定一个 E_{i} 的值，表示电势。

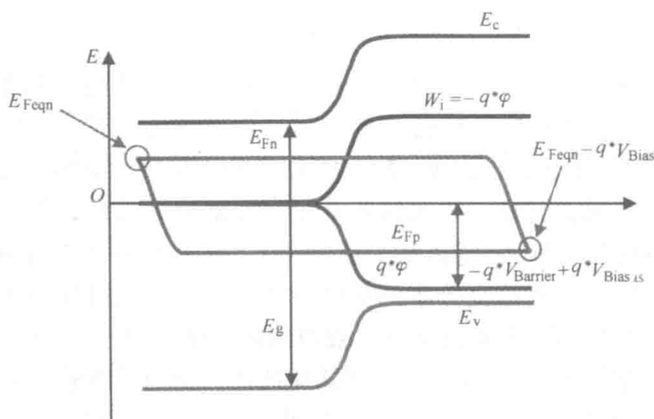


图6.6　偏置的p－n半导体同质结的能带示意图（见本书封三彩图）

由方程（6.34）可得到p和n的表达式：

$$p = n_{\mathrm{i}}\exp\left(\frac{-q\varphi + q\varphi_{\mathrm{p}}}{kT}\right) \tag{6.35a}$$

$$n = n_{\mathrm{i}}\exp\left(\frac{-q\varphi_{\mathrm{n}} + q\varphi}{kT}\right) \tag{6.35b}$$

由方程（6.35）和方程（6.30），可以得到三个未知数的三个方程式组，从而可以求数值解。现在，我们关注两个FD节点之间的函数值的逼近。为了避免众多相关参数复杂的表达式带来的理解混乱，我们考虑一个载流子迁移率均匀分布的同质结，并用DeMari[3]的标量方程推导（因为对电流连续性，如果复合率在不同半导体构成的异质结上连续，则可以快速地将这种方法扩展到异质结分析上）。将方程（6.35）代入方程（6.30），再做标量化后，可得到

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\tilde{x}^2} - \exp(u-v) + \exp(w-u) + \dfrac{(N_{\mathrm{D}}^{+} - N_{\mathrm{A}}^{-})}{n_{\mathrm{i}}} = 0 = EQu \\ \dfrac{\mu_{\mathrm{n}} n_i U_{\mathrm{T}}}{L_i^2} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{x}}\left\{\exp(u-v)\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right\} + R = 0 = EQv \\ \dfrac{\mu_{\mathrm{p}} n_i U_{\mathrm{T}}}{L_i^2} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{x}}\left\{\exp(w-u)\dfrac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right\} - R = 0 = EQw \end{cases} \tag{6.36}$$

式中，u，v，w 和$\tilde{x}$为

$$\tilde{x}=x/L_i;\ L_i=\sqrt{\frac{\varepsilon U_T}{qn_i}};\ u=\frac{\varphi}{U_T};\ v=\frac{\varphi_n}{U_T};\ w=\frac{\varphi_p}{U_T}$$

求解方程（6.36）的第一步是用非线性代数方程组逼近非线性微分方程。与“无偏置 p-n 结中的电势分布”一节相同，我们依然可以使用 FDM。在“无偏置 p-n 结中的电势分布”一节中，我们已经讨论过应用 FDM 逼近泊松方程的内容。所以在这里，我们关注电流连续性方程。为了简单起见，我们用统一的 FD 网格。如果 ε、μ_n 和 μ_p 在 FD 网格节点位置不连续，则对方程（6.36），有如下 FD 近似式：

$$\begin{cases}\dfrac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta x^2}-\exp(u_i-v_i)+\exp(w_i-u_i)+\left.\dfrac{(N_D^+-N_A^-)}{n_i}\right|_i=0=EQu_i\\[2ex]\dfrac{\mu_n n_i U_T}{L_i^2}\dfrac{1}{\Delta x}\left\{\exp(\mu_{i+1/2}-v_{i+1/2})\left.\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right|_{i+1/2}-\exp(u_{i-1/2}-v_{i-1/2})\left.\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right|_{i-1/2}\right\}+R=0=EQv_i\\[2ex]\dfrac{\mu_p n_i U_T}{L_i^2}\dfrac{1}{\Delta x}\left\{\exp(w_{i+1/2}-u_{i+1/2})\left.\dfrac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right|_{i+1/2}-\exp(w_{i-1/2}-u_{i-1/2})\left.\dfrac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right|_{i-1/2}\right\}-R=0=EQw_i\end{cases}\tag{6.37}$$

式中，Δx 为两个 FD 节点的间距；符号 $|_i$ 意思为在节点 $x=x_i$ 处当前的表达式。在方程（6.37）中，载流子浓度值和准费米能级在两个 FD 节点中间的导数值现在未知。因此，我们需要逼近这两个值。进行合适的逼近计算并不简单，所以我们现在需要注意这个问题。文献中有各种方法可以得到这些逼近值。例如，可以简单地利用指数函数的几何平均数近似[35]方程（6.11）中的电子电流连续性方程，在无复合的情况下，可以得到如下近似：

$$\exp\left[\frac{(u_{i+1}-v_{i+1}+u_i-v_i)}{2}\right]\frac{(v_{i+1}-v_i)}{\Delta x^2}-\exp\left[\frac{(u_i-v_i+u_{i-1}-v_{i-1})}{2}\right]\frac{(v_i-v_{i-1})}{\Delta x^2}=EQv_i$$

不过，这样的有限差分离散格式会产生伪振荡[16,36]。文献中广泛采用的，可以正确预测解行为的方法是使用贝努利函数，Scharfetter 和 Gummel[37] 提出和验证了这种方法，文献中用两种途径推导了这种近似法，一种途径得到了方程（6.37）的等价形式：

$$\begin{cases}\dfrac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta x^2}-\exp(u_i-v_i)+\exp(w_i-u_i)+\left.\dfrac{(N_D^+-N_A^-)}{n_i}\right|_i=0=EQu_i\\[2ex]\dfrac{1}{\Delta x}\{J_{nx}|_{i+1/2}-J_{nx}|_{i-1/2}\}+R=0=EQv_i\\[2ex]\dfrac{1}{\Delta x}\{J_{px}|_{i+1/2}-J_{px}|_{i-1/2}\}-R=0=EQw_i\end{cases}$$

这样，问题就简化为在已知 FD 节点的电势和载流子密度，计算 FD 节点半距离位置的电流最优值。从而得到一个微分方程[16,38]。如，利用式（6.29），计算 $x=x_{i+1/2}$处的 J_{nx}的最优值。从而得到如下微分方程：

$$J_{nx}\mid_{i+1/2}=q\mu_n\frac{d\varphi}{dx}n+qD_n\frac{dn}{dx} \tag{6.38}$$

用已知的 $x=x_i$ 和 $x=x_{i+1}$处的电子浓度作为边界条件，即可求解。方程（6.38）中的未知数是电子浓度 $n(x)$和 J_{nx}在 $x=x_{i+1/2}$的值，假设因子

$$q\mu_n\frac{d\varphi}{dx}$$

已知且为常数。所以，问题（6.38）实质上是非均匀常微分方程问题，它可以快速的求解出电子浓度 $n(x)$和 J_{nx}在 $x=x_{i+1/2}$的值。求出解以后，就可以用 n 在边界点上的值，即 $n(x=x_i)$和 $n=(x=x_{i+1})$，表示 J_{nx}在 $x=x_{i+1/2}$的值。

另一种途径基于文献［16］，使用了中值定理。因为这个方法可以轻松的跟踪近似的截断误差，并可以直接用于方程（6.37），我们在下面详细讲解这种方法。

积分中值定理是，如果函数 $f(x)$ 在区间 (a,b) 内连续，则存在 c 属于 (a,b)，有[39]

$$f(x=c)(b-a)=\int_a^b f(x)\,dx \tag{6.39}$$

如果式（6.39）成立，则对两个函数 $f(x)$和 $g(x)$的积连续，有

$$g(x=c_1)f(x=c_1)(b-a)=\int_a^b g(x)f(x)\,dx \tag{6.40}$$

不过，点 c_1 一般不等于式（6.39）中的 c。联立式（6.39）和式（6.40），可得到

$$g(x=c_1)\frac{f(x=c_1)}{f(x=c)}\int_a^b f(x)\,dx=\int_a^b g(x)f(x)\,dx \tag{6.41}$$

现在，对式（6.41）左侧函数 $f(x)$和 $g(x)$积分，我们在(a,b)的中点 c_2 对 $g(x)$用泰勒级数展开，在 c 对 $f(x)$做泰勒级数展开：

$$\left(g(x=c_2)+g'(x=c_2)(c_1-c_2)+\text{HOT}\right)\left(1+\frac{f'(x=c)}{f(x=c)}(c_1-c)+\text{HOT}\right)\int_a^b f(x)\,dx$$
$$=\int_a^b g(x)f(x)\,dx \tag{6.42}$$

在式（6.42）中，撇号代表求导，HOT 代表高阶泰勒级数项。我们观察到 $|c_1-c_2|\leqslant|b-a|/2=h/2$，和 $|c_1-c|\leqslant|b-a|=h$，其中 $h=|a-b|$。所以，我们最后可以得到：

$$g(x = c_2)\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + O(h) \approx \int_a^b g(x)f(x)\,\mathrm{d}x \tag{6.43}$$

其中近似导致误差的项正比于 h。一个更简单得到式（6.43）的方法是用广义中值定理[40]。不过，这种近似方法只适用于函数 $f(x)$ 在 (a,b) 区间内符号不变的情况。

现在，我们将注意力转到下面的等式[16]：

$$\mathrm{e}^{u}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-u} = -\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \tag{6.44}$$

从 FD 节点 x_i 到 x_{i+1} 求式（6.18）的积分，可得

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} \mathrm{e}^{u}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}x = u_i - u_{i+1} \tag{6.45}$$

在 6.45 的左侧，我们将 e^u 作为 $g(x)$，将 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x(\mathrm{e}^{-u})$ 作为 $f(x)$，由式（6.43）得

$$\mathrm{e}^{u_{i+1/2}}\int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}x = u_i - u_{i+1} \tag{6.46}$$

求出式（6.46）的积分，可以得到如下在 $x = x_{i+1/2}$ 处 e^u 的近似：

$$\mathrm{e}^{u_{i+1/2}} = \frac{u_i - u_{i+1}}{\mathrm{e}^{-u_{i+1}} - \mathrm{e}^{-u_i}} = B(\Delta u)\mathrm{e}^{u_i} = B(-\Delta u)\mathrm{e}^{u_{i+1}} \tag{6.47}$$

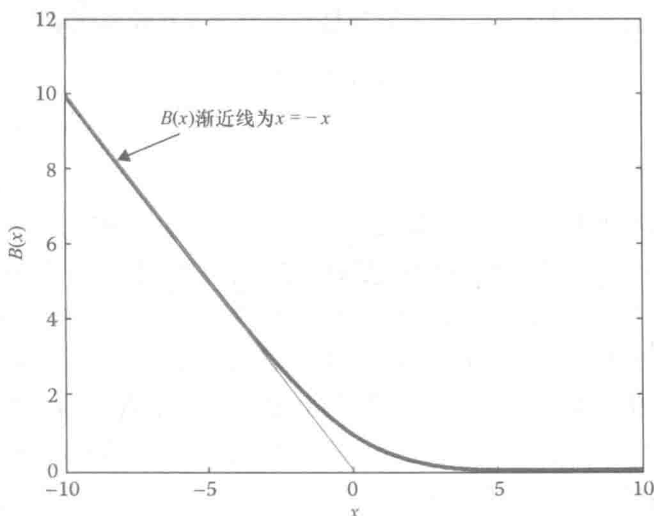


图 6.7　贝努利函数 $B(x)$

其中 $\Delta u = u_i - u_{i+1}$，$B(x)$ 为贝努利函数（见图 6.7）：

$$B(x) = \frac{x}{\exp(x) - 1}$$

用式（6.47）在两个 FD 网格节点的中点表示指数函数值，可得到方程

(6.27) 在节点 x_i 的近似式:

$$\begin{cases} \left.\dfrac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta x^2}-\exp(u_i-v_i)+\exp(w_i-u_i)+\dfrac{(N_D^+-N_A^-)}{n_i}\right|_i \\ \quad =0=EQu_i(u_{i+1},u_i,u_{i-1},v_i,w_i) \\ B(u_i-v_i-u_{i+1}+v_{i+1})\dfrac{(v_{i+1}-v_i)}{\Delta x^2}-B(u_i-v_i-u_{i-1}+v_{i-1})\dfrac{(v_i-v_{i-1})}{\Delta x^2} \\ \quad +\dfrac{L_i^2}{\mu_n n_i U_T}R\exp(v_i-u_i)=0=EQv_i(u_{i+1},u_i,u_{i-1},v_{i+1},v_i,v_{i-1}) \\ B(w_i-u_i-w_{i+1}+u_{i+1})\dfrac{(w_{i+1}-w_i)}{\Delta x^2}-B(w_i-u_i-w_{i-1}+u_{i-1})\dfrac{(w_i-w_{i-1})}{\Delta x^2} \\ \quad -\dfrac{L_i^2}{\mu_n n_i U_T}R\exp(u_i-w_i)=0=EQw_i(u_{i+1},u_i,u_{i-1},w_{i+1},w_i,w_{i-1}) \end{cases} \tag{6.48}$$

我们注意到，为了得到方程 (6.48)，首先需要用标准中心有限差分对式 (6.37) 中的导数做近似:

$$\left.\frac{dv}{d\tilde{x}}\right|_{i+1/2}=\frac{1}{\Delta x}(v_{i+1}-v_i) \qquad \left.\frac{dv}{d\tilde{x}}\right|_{i-1/2}=\frac{1}{\Delta x}(v_i-v_{i-1}) \tag{6.49}$$

为了得到稳健性好的代码，需要对贝努利函数及其在较小变量值的导数做近似:

$$B(x)\approx 1-\frac{1}{2}x;$$

$$B'(x)\approx -\frac{1}{2}+\frac{1}{6}x$$

同样，对所有 FD 节点写出方程 (6.48)，并考虑边界条件，可以得到在 FD 节点近似式 (6.36) 的一组非线性代数方程。求解这个方程组有两种方法。这两种方法都通过迭代计算非线性代数方程的解。两种算法中的其中一种（联立解法）会根据上一个未知数的值联立更新电势和准费米能级的值。而另一种算法会对电势和准费米能级的值分别更新。第一种算法的实现基于牛顿 - 拉富生法（N - R)。后一种算法（分立解法）最初由 Gummel[41] 提出，并由 Slotoom 进一步完善[12]。分立求解方程的缺陷，在于算法求解的收敛性相对较慢，特别是对大偏置电流的情况，以及研究瞬态问题的时候[15]。不仅如此，在一些情况中，即使选择非常接近于解的初始条件，分立解法也无法收敛[42]，一些文献[43]对分立解法进行了改进工作。但是，对任意结构的分立解法的收敛性并没有改进。N - R 算法，作为联立求解方程方法的核心，在接近解的时候会有二次项速率的收敛性提升[26]。不过，虽然 N - R 算法总是沿着最大梯度方向求解，也可能出现不收敛的情况，这是因为

N－R 算法在大偏置电压情况下过冲较严重，特别是在后续的 N－R 更新始终距离解较远的情况时[36]。这会导致 N－R 算法一系列的更新都在解附近游移。一些策略可以避免这一问题，其中一种解决办法，是通过近似解析法选取接近解的初始条件[44]，不过，这样的算法只适用于近似解析法可以使用的结构；另一种方法是首先计算零偏的解，然后逐渐缓慢的增加偏置电压，知道逼近工作电压[25]。这一方法的缺点是，特别是对大偏置电压值的情况，电压增量必须非常小以保证收敛性，因此计算时间会过长。应用全局 N－R 算法的稳健性和计算效率相对较好[26]。Rose 和 Bank 提出了用回溯策略优化全局 N－R 算法求解漂移扩散方程[45,46]。其他为全局算法提供稳健性的策略基于数值路径跟踪（NRF）[47,48]。在这种方法中，会以一个已知解的简单问题做初始计算，然后引入定义路径的参数，捕捉初始问题到目标问题之间解的路径。跟踪解分为两个步骤。首先，沿着路径的切向量方向预测解。然后，用 N－R 法修正解。为完整器件，还要提及基于分立算法和联立算法混合的算法[44,49,50]。这种方法的主要难点在于没有何时该从分立算法切换到联立算法的清晰的界限。

因为所有求解漂移－扩散方程的全局收敛数值算法都基于 N－R 算法，我们下面将详细讨论 N－R 算法用于求解使用 FDM（6.48）的方程（6.37）的解。

在用贝努利函数近似电流连续性方程后，用牛顿－拉富生法求解方程（6.48），得到

$$\text{Jacobian} * V^{\text{NEW}} = -EQ(V^{\text{OLD}}) + \text{Jacobian} * V^{\text{OLD}} \tag{6.50}$$

其中 Jacobian 矩阵为

$$\text{Jacobian} = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial EQu}{\partial u} & \dfrac{\partial EQu}{\partial v} & \dfrac{\partial EQu}{\partial w} \\ \dfrac{\partial EQv}{\partial u} & \dfrac{\partial EQv}{\partial v} & \dfrac{\partial EQv}{\partial w} \\ \dfrac{\partial EQw}{\partial u} & \dfrac{\partial EQw}{\partial v} & \dfrac{\partial EQw}{\partial w} \end{vmatrix} \tag{6.51}$$

向量 V 为函数 u、v、w 的集合：

$$V = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \tag{6.52}$$

Jacobian 包含了九个子矩阵。如子矩阵

$$\frac{\partial EQu}{\partial u}$$

为以下形式：

$$\frac{\partial EQu}{\partial u}=\begin{vmatrix}\frac{\partial EQu_1}{\partial u_1} & \frac{\partial EQu_1}{\partial u_2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ 0 & \ddots & & & . & & \vdots\\ \cdots & 0 & \frac{\partial EQu_i}{\partial u_{i-1}} & \frac{\partial EQu_i}{\partial u_i} & \frac{\partial EQu_i}{\partial u_{i+1}} & 0 & \cdots\\ \vdots & & & & & \ddots & 0\\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial EQu_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial EQu_N}{\partial u_N}\end{vmatrix} \tag{6.53}$$

我们引入以下准费米能级边界条件（见图6.6）：

$$E_{Fn}(x=-L_L)=E_{Feqn}-W_i(x=-L_L)=kT\ln\left(\frac{|N_d(x=-L_L)|}{n_i(x=-L_L)}\right) \tag{6.54a}$$

$$E_{Fp}(x=-L_L)=E_{Fn}(x=-L_L) \tag{6.54b}$$

$$E_{Fn}(x=L_P)=kT\ln\left(\frac{|N_d(x=-L_L)|}{n_i(x=-L_L)}\right)-qV_{Bias} \tag{6.54c}$$

$$E_{Fp}(x=L_P)=E_{Fn}(x=L_P) \tag{6.54d}$$

最后，我们将牛顿 - 拉富生法求解方程（6.37）的实现过程总结在算法6.2中。

算法6.2　有限差分法计算偏置同质结的电势和准费米能级分布

1. 开始；
2. 选择 Δx 和采样点；
3. 设置偏置电压；
4. 设置初始偏置电压（通常为零偏），和偏置电压步长；
5. 设置初始偏置电压下的初始条件 V^{OLD}；
6. 由（6.50）计算 V^{NEW}；
7. 如果 $V^{OLD}-V^{NEW}>$余差，则 $V^{OLD}=V^{NEW}$，跳转到步骤6；
8. 如果未到偏置电压预设置，则改变偏压步长以增大偏置电压，并跳转到步骤6，设 V^{NEW} 为初始值；
9. 停止。

算法6.2可以按算法6.1相同的步骤，用MATLAB程序执行。其代码如下所示：

```
% program calculates the band structure of biased
% diode,Bernoulli
% SRH recombination and N-R backtracking
% Si like diode from IEEE TED 1999 pp396-412
clear % clears variables
clear global % clears global variables
```

```
% initial constants
I = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;
c = 2.998e+2;% speed of light in free space [mi/ps]
q = 1.602e-19;% elemental charge [C]
h_s = 6.62606885e-34;% Planck's constant [J*ps]
kB = 1.3807e-23;% Boltzman's constant [J/K]
T = 300.;% temperature [K]
kT = kB*T/q;% kT [eV]
UT = kB*T/q;% UT thermal potential [V]
eps0 = 8.854e-18;% vacum permittivity [F/mi]
m0 = 9.11e-31;% electron mass [kg]

% input diode parameters (Si)
Wg_n = 1.12;% bandgap [eV]
eps_n = 11.7;% relative dielectric constant
miu_n = 0.1;%electron mobility [mi^2/(V*ps)]
miu_p = 0.1;%hole mobility [mi^2/(V*ps)]

% n side first
ND = 1e+4;% effective dopant concentration [1/mi3]
thick_n = 5.0;% thickness [mi]

% p side
NA = ND;% effective dopant concentration [1/mi3]
thick_p = 5.0;% thickness [mi]

% calculating basic parameters for n side and p side:
Nc_n = 2.e+7;%electron effective density of states [1/mi3]
Nv_n = 2.e+7;%hole effective density of states [1/mi3]
ni_n = 7.82e-3;% intrinsic carrier concentration [1/mi3]

% Barrier potential calculated directly since energy
% is expressed in eV
VBarrier = kT*log(abs(ND)/ni_n)+kT*log(abs(NA)/ni_n)

% recombination coefficient
tau = 10;%SRH lifetime [ps]
B_n = eps_n*eps0/(tau*ni_n*q*miu_n);
B_p = eps_n*eps0/(tau*ni_n*q*miu_p);

% normalising relevant parameters
Nc_n = Nc_n/ni_n
Nv_n = Nv_n/ni_n
ND = ND/ni_n
NA = NA/ni_n
Wg_n = Wg_n/UT
Li = sqrt(eps_n*eps0*UT/(q*ni_n))%Debye length
VBarrier = VBarrier/UT
```

```
% calculation parameters
thick = (thick_n+thick_p)/Li;% device length [Li]
N_po = 100;% number of points on L
dx = thick/(N_po);% step dz [Li]
x_pos = dx*(1:N_po)';

% setting doping profile
for i = 1:N_po/2
    KN(i) = ND;
    KN(i+N_po/2) = -NA;
end
w = log(abs(KN(1)))%boundary condition for Fermi levels

% bias voltage
VBias = 0.6;%bias voltage [V]
dVBias = 0.01;%bias voltage step
%normalisation of bias voltage and of the bias voltage step
VBias = VBias/UT;
dVBias = dVBias/UT;

% initial voltage and quasi-Fermi level distribution
for i = 1:N_po/2
    ui(i) = 0.0;
    ui(i+N_po/2) = -(VBarrier-VBias);
    vi(i) = -w;
    vi(i+N_po/2) = -(w-VBias);
    wi(i) = -w;
    wi(i+N_po/2) = -(w-VBias);
end

ue(2:N_po+1) = ui;
ve(2:N_po+1) = vi;
we(2:N_po+1) = wi;

%external loop stepping up bias voltage
for jbias = 1:2
% setting boundary conditions
ue(1) = 0;
ue(N_po+2) = -(VBarrier-VBias);
ve(1) = -w;
ve(N_po+2) = -(w-VBias);
we(1) = -w;
we(N_po+2) = -(w-VBias);

for j = 1:4000%main loop start
% setting auxiliary vectors
for i = 1:N_po
a1(i) = ue(i+1)-ve(i+1)-ue(i+2)+ve(i+2);
a2(i) = ue(i+1)-ve(i+1)-ue(i)+ve(i);
b1(i) = we(i+1)-ue(i+1)-we(i+2)+ue(i+2);
b2(i) = we(i+1)-ue(i+1)-we(i)+ue(i);
```

```
A3(i) = (ve(i+2)-ve(i+1))/(dx*dx);
A4(i) = (ve(i+1)-ve(i))/(dx*dx);
B3(i) = (we(i+2)-we(i+1))/(dx*dx);
B4(i) = (we(i+1)-we(i))/(dx*dx);
end

for i = 1:N_po
a3(i) = ui(i)-vi(i);
b3(i) = wi(i)-ui(i);
A1(i) = Bern(a1(i));
A2(i) = Bern(a2(i));
AP1(i) = Bernp(a1(i));
AP2(i) = Bernp(a2(i));
B1(i) = Bern(b1(i));
B2(i) = Bern(b2(i));
BP1(i) = Bernp(b1(i));
BP2(i) = Bernp(b2(i));
E1(i) = exp(a3(i));
E2(i) = exp(b3(i));
end

DEN = E1+E2+2;
NUM1 = E2-1./E1;
NUM2 = E1-1./E2;

% setting off diagonals of Jacobian for dEQudu
for i = 1:N_po
    left_diag(i) = 1.0/(dx*dx);
    right_diag(i) = 1.0/(dx*dx);
end

% setting Jacobian elements start VVVVVVVVVVV
% setting dEQudu, dEQudv, dEQudw
main_diag = -2.0/(dx*dx)-E1-E2;
dEQudu = spdiags([left_diag' main_diag' right_diag'],…
-1:1, N_po, N_po);
dEQudv = spdiags([E1'],0,N_po, N_po);
dEQudw = spdiags([E2'],0,N_po, N_po);

% setting dEQvdu, dEQvdv, dEQvdw
left_diag = AP2.*A4;
left_diag = [left_diag(2:N_po) 0];%shifting for spdiags
main_diag = AP1.*A3-AP2.*A4+B_n*((-E2+1./E1).*DEN-NUM1.*…
(E1+E2))./(DEN.*DEN);
right_diag = -AP1.*A3;
right_diag = [0 right_diag(1:N_po-1)];%shifting for spdiags
dEQvdu = spdiags([left_diag' main_diag' right_diag'],…
-1:1, N_po, N_po);

left_diag = -AP2.*A4+A2/(dx*dx);
left_diag = [left_diag(2:N_po) 0];
```

```
main_diag = -AP1.*A3+AP2.*A4-A1/(dx*dx)-A2/(dx*dx)+...
    B_n*((-DEN./E1)+NUM1.*E1)./(DEN.*DEN);
right_diag = AP1.*A3+A1/(dx*dx);
right_diag = [0 right_diag(1:N_po-1)];
dEQvdv = spdiags([left_diag' main_diag' right_diag'],...
-1:1, N_po, N_po);

dEQvdw = spdiags([(B_n*(E2.*DEN-NUM1.*(E1+E2))./...
(DEN.*DEN))'],0,N_po, N_po);

% setting dEQwdu, dEQwdv, dEQwdw
left_diag = -BP2.*B4;
left_diag = [left_diag(2:N_po) 0];
main_diag = -BP1.*B3+BP2.*B4-B_p*((E1-1./E2).*DEN-NUM2.*...
(E1+E2))./(DEN.*DEN);
right_diag = BP1.*B3;
right_diag = [0 right_diag(1:N_po-1)];
dEQwdu = spdiags([left_diag' main_diag' right_diag'],...
-1:1, N_po, N_po);

left_diag = BP2.*B4+B2/(dx*dx);
left_diag = [left_diag(2:N_po) 0];
main_diag = BP1.*B3-BP2.*B4-B1/(dx*dx)-B2/(dx*dx)-...
B_p*((DEN./E2)-NUM2.*E2)./(DEN.*DEN);
right_diag = -BP1.*B3+B1/(dx*dx);
right_diag = [0 right_diag(1:N_po-1)];
dEQwdw = spdiags([left_diag' main_diag' right_diag'],...
-1:1, N_po, N_po);

dEQwdv = spdiags([(-B_p*((DEN.*E1)+NUM2.*E1)./...
(DEN.*DEN))'], 0, N_po, N_po);

% setting the Jacobian
Jacobian = [dEQudu dEQudv dEQudw;dEQvdu dEQvdv...
dEQvdw;dEQwdu dEQwdv dEQwdw];

% setting Jacobian elements finish VVVVVVVVVV

% setting dEQu, dEQv and EQw
for i = 2:N_po+1
    EQu(i-1)=-(2.0*ue(i)-ue(i-1)-ue(i+1))/(dx*dx)-...
    exp(ue(i)-ve(i))+exp(we(i)-ue(i))+KN(i-1);
end
EQv = A1.*A3-A2.*A4+B_n*(E2-1./E1)./DEN;
EQw = B1.*B3-B2.*B4-B_p*(E1-1./E2)./DEN;

% setting F
EQ = [EQu EQv EQw];
FF1 = EQ*EQ';
```

```
%creating unknown vector
Vi = [ui vi wi];

dVi = -Jacobian\EQ';
Vi = Vi+dVi';
ui = Vi(1:N_po);vi = Vi(N_po+1:2*N_po);
wi = Vi(2*N_po+1:3*N_po);
ue(2:N_po+1) = ui;ve(2:N_po+1) = vi;we(2:N_po+1) = wi;
residual = dVi'*dVi;
[j residual VBias*UT]
if residual < 1.e-5,break,end%residual check

% backtracking start ********************
for i = 1:N_po
a1(i) = ue(i+1)-ve(i+1)-ue(i+2)+ve(i+2);
a2(i) = ue(i+1)-ve(i+1)-ue(i)+ve(i);
b1(i) = we(i+1)-ue(i+1)-we(i+2)+ue(i+2);
b2(i) = we(i+1)-ue(i+1)-we(i)+ue(i);
A3(i) = (ve(i+2)-ve(i+1))/(dx*dx);
A4(i) = (ve(i+1)-ve(i))/(dx*dx);
B3(i) = (we(i+2)-we(i+1))/(dx*dx);
B4(i) = (we(i+1)-we(i))/(dx*dx);
end

for i = 1:N_po
a3(i) = ui(i)-vi(i);
b3(i) = wi(i)-ui(i);
A1(i) = Bern(a1(i));
A2(i) = Bern(a2(i));
AP1(i) = Bernp(a1(i));
AP2(i) = Bernp(a2(i));
B1(i) = Bern(b1(i));
B2(i) = Bern(b2(i));
BP1(i) = Bernp(b1(i));
BP2(i) = Bernp(b2(i));
E1(i) = exp(a3(i));
E2(i) = exp(b3(i));
end

DEN = E1+E2+2;
NUM1 = E2-1./E1;
NUM2 = E1-1./E2;

% setting dEQu, dEQv and EQw
for i = 2:N_po+1
    EQu(i-1)=-(2.0*ue(i)-ue(i-1)-ue(i+1))/(dx*dx)-...
    exp(ue(i)-ve(i))+exp(we(i)-ue(i))+KN(i-1);
end
EQv = A1.*A3-A2.*A4+B_n*(E2-1./E1)./DEN;
EQw = B1.*B3-B2.*B4-B_p*(E1-1./E2)./DEN;
```

```
% setting F
EQ = [EQu EQv EQw];
FF2 = EQ*EQ';

lambda = 0.5;%N-R backtracking parameter
if FF2 > FF1
   Vi = Vi-lambda*dVi';
   ui=Vi(1:N_po);vi=Vi(N_po+1:2*N_po);
   wi=Vi(2*N_po+1:3*N_po);
   ue(2:N_po+1)=ui;ve(2:N_po+1)=vi;we(2:N_po+1)=wi;
end
% backtracking end ***************************


end%main loop stop

[j dVi'*dVi VBias*UT]
VBias = VBias+dVBias;


end%external loop stop

plot(x_pos*Li,ui*UT,x_pos*Li,-ui*UT,x_pos*Li,-vi*UT,…
x_pos*Li,-wi*UT)
xlabel('x [micrometer]','FontSize',24)
ylabel('E/UT','FontSize',24)
```

在 MATLAB 主程序的目录下，需要有贝努利函数和其导数的文件，它们分别为

Bern. m

```
% calculates Bernoulli function
function wynik = Bern(x)
if abs(x) < 0.01
       wynik = 1-x/2+x*x/12-x*x*x*x/720;
else
       wynik = x/(exp(x)-1);
end
```

Bernp.m

```
% calculates derivative of Bernoulli function
function wynik = Bernp(x)
if abs(x) < 0.01
       wynik = -1/2+x/6-x*x*x/180;
else
       wynik = (exp(x)-1-x*exp(x))/(exp(x)-1)^2;
end
```

我们使用的贝努利函数实现相对简单，它对我们的测试计算有足够的稳健性。更详细的方法请参考 Collins[5]。程序值考虑了非平衡载流子（Shockley – Read – Hall，SRH）复合，对在带隙中央的单一热复合能级，玻尔兹曼分布下，其复合率表达式为

$$R=\frac{pn-n_{\mathrm{i}}^{2}}{\tau_{\mathrm{n}}(n+n_{\mathrm{i}})+\tau_{\mathrm{p}}(p+n_{\mathrm{i}})} \tag{6.55}$$

在仿真中，我们假设 SRH 寿命 $\tau_p=\tau_n=\tau=10\text{ps}$。我们设 n 区的初始准费米分布等于 E_{Feqn}，p 区等于 $E_{\text{Feqn}}-qV_{\text{Bias}}$（见图 6.6），初始电势分布在 n 区等于零，在 p 区等于 $-(V_{\text{Barrier}}-V_{\text{Bias}})$。我们添加了额外的循环以计算零偏（或指定的偏置），在当前解和工作点间逐步升高偏置电压。

软件还包括一个简单的 N－R 回溯流程，它对高偏置电压情况非常重要。这里我们采用了一个非常简单的回溯算法。参数“Lambda”设置了回溯数量。算法从式（6.50）得出的 V^{NEW} 到 lambda ∗ （$V^{\text{NEW}}-V^{\text{OLD}}$）值之间进行回溯。所以，lamda＝0 对应了没有回溯。而 lamda＝1 表示从前一次迭代回溯到未知向量。回溯参数固定的回溯算法的代价是收敛率较低。在计算过程中回溯数量可变，可以提高算法的效率，在接近解的时候可以增大步长。

对于文献［17］中涉及的“类 Si”二极管测试结构，上述软件可以在 0.55V 以下不进行回溯。当偏置电压为 0.6V 时，需要进行 N－R 回溯。这个时候，可设 lamda＝0.5。

图 6.8 和 6.9 表示了 GaAs 同质结的能带图计算实例。其中 p 和 n 的掺杂浓度均为 $10^{16}/\text{cm}^3$，偏置电压分别为 0.2V 和 0.6V。我们用 1000 个有限差分点对两个情况进行仿真。图 6.8 和图 6.9 的结果不需要采用回溯。

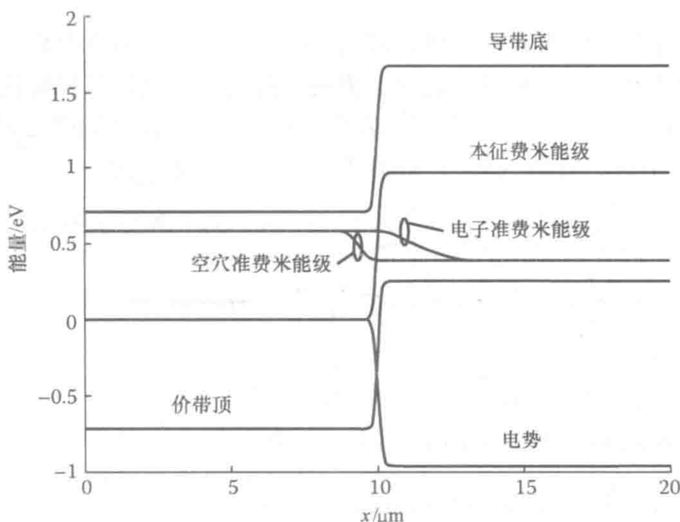


图 6.8　计算得到的 GaAs 同质结的能带示意图

（p 侧和 n 侧的施主浓度都为 $10^{16}/\text{cm}^3$，偏置电压为 0.2V，仿真使用一千个 FD 节点，其他建模参数见表 6.1）

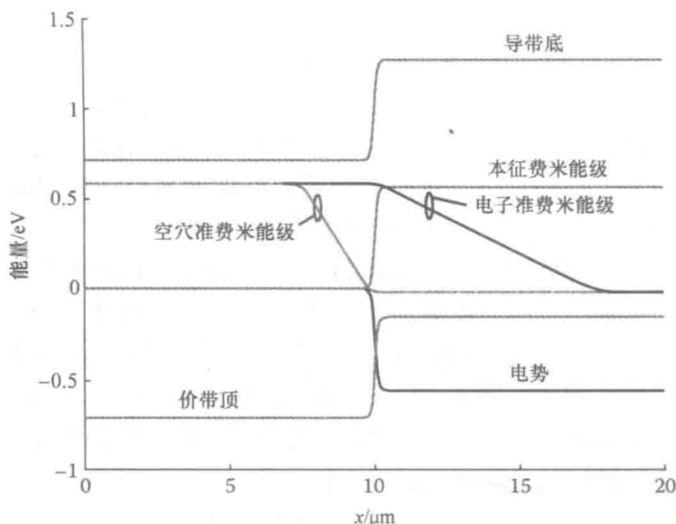


图 6.9 计算得到的 GaAs 同质结的能带示意图
（p 侧和 n 侧的施主浓度都为 $10^{16}/cm^3$，偏置电压为 0.6V，
仿真使用一千个 FD 节点，其他建模参数见表 6.1）

6.4 光子半导体器件中的电流建模

如果有限差分网格为规范网格，则前文中讨论的方法可以向对直接的应用于二维（2D）和 3D 分析。总而言之过程上相同。首先将偏微分方程转化为一组非线性代数方程，然后用 N－R 法求解代数方程。举例说明，让我们考虑对称 p－n 结的 2D 分析。这种情况，方程（6.6）和方程（6.11）可表示为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\varepsilon\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\left(\varepsilon\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}y}\right)+q(p-n+N_{\mathrm{D}}-N_{\mathrm{A}})=0=0\\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\mu_{\mathrm{n}}n\dfrac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}x}\right\}+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\left\{\mu_{\mathrm{n}}n\dfrac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{n}}}{\mathrm{d}y}\right\}=-R\\ \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\mu_{\mathrm{p}}p\dfrac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}x}\right\}+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\left\{\mu_{\mathrm{p}}p\dfrac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}y}\right\}=R\end{cases}\tag{6.56}$$

再次用 DeMari 标量化对称的 p－n 结，可得

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\tilde{x}^2}+\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\tilde{y}^2}-\exp(u-v)+\exp(w-u)+\dfrac{(N_{\mathrm{D}}^{+}-N_{\mathrm{A}}^{-})}{n_{\mathrm{i}}}=0=EQu\\ \dfrac{\mu_{\mathrm{n}}n_iU_{\mathrm{T}}}{L_{\mathrm{i}}^2}\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{x}}\left\{\exp(u-v)\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right\}+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{y}}\left\{\exp(u-v)\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\tilde{y}}\right\}\right)+R=0=EQv\\ \dfrac{\mu_{\mathrm{p}}n_iU_{\mathrm{T}}}{L_{\mathrm{i}}^2}\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{x}}\left\{\exp(w-u)\dfrac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\tilde{x}}\right\}+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{y}}\left\{\exp(w-u)\dfrac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\tilde{y}}\right\}\right)-R=0=EQw\end{cases}\tag{6.57}$$

对式（6.57）使用 Shrafeter - Gummel FD 离散 2D 标准正方形网格，可得

$$\begin{cases}\left.\dfrac{u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j}-4u_{i,j-1}}{h^2}-\exp(u_{i,j}-v_{i,j})+\exp(w_{i,j}-u_{i,j})+\dfrac{(N_D^+-N_A^-)}{n_i}\right|_i \\ =0=EQu_i(u_{i+1,j},u_{i,j},u_{i-1,j},u_{i,j+1},u_{i,j-1},v_{i,j},w_{i,j}) \\ B(u_{i,j}-v_{i,j}-u_{i+1,j}+v_{i+1,j})\dfrac{(v_{i+1,j}-v_{i,j})}{h^2}-B(u_{i,j}-v_{i,j}-u_{i-1,j}+v_{i-1,j})\dfrac{(v_{i,j}-v_{i-1,j})}{h^2} \\ +B(u_{i,j}-v_{i,j}-u_{i,j+1}+v_{i,j+1})\dfrac{(v_{i,j+1}-v_{i,j})}{h^2}-B(u_{i,j}-v_{i,j}-u_{i,j-1}+v_{i,j-1})\dfrac{(v_{i,j}-v_{i,j-1})}{h^2} \\ +\dfrac{L_i^2}{\mu_n n_i U_T}R\exp(v_{i,j}-u_{i,j})=0= \\ =EQv_i(u_{i,j},u_{i+1,j},u_{i-1,j},u_{i,j+1},u_{i,j-1},v_{i,j},v_{i+1,j},v_{i-1,j},v_{i,j+1},v_{i,j-1},) \\ B(w_{i,j}-u_{i,j}-w_{i+1,j}+u_{i+1,j})\dfrac{(w_{i+1,j}-w_{i,j})}{h^2}-B(w_{i,j}-u_{i,j}-w_{i-1,j}+u_{i-1,j})\dfrac{(w_{i,j}-w_{i-1,j})}{h^2} \\ +B(w_{i,j}-u_{i,j}-w_{i,j+1}+u_{i,j+1})\dfrac{(w_{i,j+1}-w_{i,j})}{h^2}-B(w_{i,j}-u_{i,j}-w_{i,j-1}+u_{i,j-1})\dfrac{(w_{i,j}-w_{i,j-1})}{h^2} \\ -\dfrac{L_i^2}{\mu_n n_i U_T}R\exp(\mu_{i,j}-w_{i,j})=0= \\ =EQw_i(u_{i,j},u_{i+1,j},u_{i-1,j},u_{i,j+1},u_{i,j-1},w_{i,j},w_{i+1,j},w_{i-1,j},w_{i,j+1},w_{i,j-1},)\end{cases} \tag{6.58}$$

式中，$h=\Delta x=\Delta y$（见图 6.10）。将方程（6.58）联立，考虑边界条件，可以再一次得到式（6.50），其中 Jacobian 矩阵有 9 个子矩阵。因此，它的求解与“偏置 p - n 结的电势和准费米能级分布”一节方法相同。唯一的不同是，2D 情况得到的 Jacobian 矩阵维数比 1D 情况大得多，所以用稀疏矩阵求解器变得很重要。投影法也有显著的帮助[2,3]。另一种方法是基于块迭代法。不过，使用快迭代法时需要小心，因为它会降低 N - R 算法的收敛率，甚至在一些情况下造成 N - R 算法发散。

将半导体器件模型扩展到多维情况的详细描述，可参考 Collins[5] 和 Ronnie[35]，它们都涉及了有限元法和有限差分法。对方程（6.27）应用于 LD（包含异质结的器件）更深入的讨论，请参考 Lee 和 Chien[4] 以及 Piprek[6]。多维模型通常需要巨大的计算资源。为了减少计算占有的内存和 CPU 时间，可以采用非均匀 FD（或是有限元[24] 网格）网格，这样可以更有效的利用 FD 节点。在 FDM 中，有一种对任意节点有限特别有效的方法，它使用了带终止行的有限箱法[5]。Buturla 等人的文献[23] 中也有很多有关漂移扩散方程求解器开发的建议。

为了完整起见，我们注意到，当在时域求解 6.11 时，因为偏微分方程组的大刚度[25,52]，我们应用了隐式 L - 稳态和 A - 稳态[51] 方法。而我们不采用 Crank - Nicholson，这种在 BPM 计算中非常流行的方案，因为它缺乏 L - 稳定性，导致不符合实际的震荡结果[25]。我们将会在第 7 章中更多的讨论光子半导体器件漂移扩散

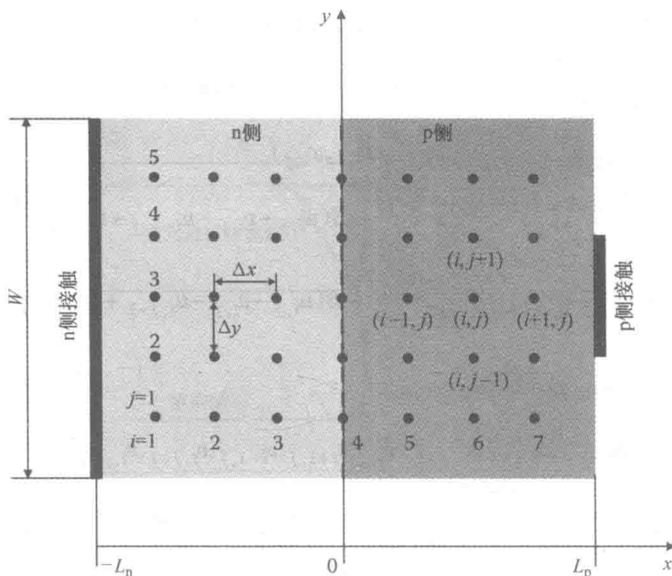


图 6.10 p-n 结节点网格分布示意一例

分析，其中包括与包括结合热求解器协同。

最后，我们对光子学中较流行的两种近似法做一个简短的阐述。这两种方法可以减小光子器件电流建模的计算开销。其中一种方法在有源区采用双极逼近［53，54］。在双极逼近下，方程（6.27）可以化简为

$$D\frac{\partial^2 N}{\partial x^2}+D\frac{\partial^2 N}{\partial z^2}=-\frac{J(x,z)}{qd}+R \tag{6.59}$$

式中，N 为有源区在 $x-z$ 平面的载流子密度；D 为扩散常数；$J(x,z)$ 为注入有源区的电流密度；d 为有源区厚度；q 为电子电荷；R 为复合率。

在应用方程（6.60）时的主要问题是，需要在求解方程（6.60）之前需要知道电流密度 J。这会失去使用方程（6.60）的优势。近似方法可以实现这一目标，通过求解拉普拉斯方程，计算出器件的电势分布。然后可以根据欧姆定律得到电流密度[55]：

$$\vec{J}=\rho E=-\rho\nabla\Psi \tag{6.60}$$

式中，ρ 为电容率。

此外，可以解析估计注入电流分布[56]。同质结双极逼近的讨论可以参考 Nakwaski 和 Osinski 的文献[57]。

参考文献

1. Joyce, W.B. and R.W. Dixon, Thermal resistance of heterostructure lasers. *Journal of Applied Physics*, 1975. 46(2): p. 855–862.
2. Saad, Y., *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd ed. 2000, Philadelphia: SIAM.

3. Barret, R., et al., *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. 1994, Philadelphia: SIAM.
4. Lee, C.C. and D.H. Chien, The effect of bonding wires on longitudinal temperature profiles of laser diodes. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. 14(8): p. 1847–1852.
5. Collins, R.E., *Mathematical Methods for Physicists and Engineers*. 1999, New York: Dover Publications Inc.
6. Piprek, J., *Semiconductor Optoelectronic Devices Introduction to Physics and Simulation*. 2003, San Diego: Academic Press.
7. Palankovski, V. and S. Selberherr, Rigorous modeling of high-speed semiconductor devices. *Microelectronics Reliability*, 2004. 44(6): p. 889–897.
8. Marshak, A.H., Modeling semiconductor-devices with position-dependent material parameters. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1989. 36(9): p. 1764–1772.
9. Marshak, A.H. and C.M. Vanvliet, Electrical-current and carrier density in degenerate materials with nonuniform band-structure. *Proceedings of the IEEE*, 1984. 72(2): p. 148–164.
10. Siegal, B., Measurement of junction temperature confirms package thermal design. Laser Focus World, 2003(11).
11. Ochalski, T.J., et al., Thermoreflectance and micro-Raman measurements of the temperature distributions in broad contact laser diodes. *Optica Applicata*, 2005. 35(3): p. 479–484.
12. Slotboom, J.W., Computer-aided 2-dimensional analysis of bipolar transistors. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1973. ED20(8): p. 669–679.
13. Mock, M.S., 2-dimensional mathematical-model of insulated-gate field-effect transistor. *Solid-State Electronics*, 1973. 16(5): p. 601–609.
14. Mock, M.S., *Analysis of Mathematical Models of Semiconductor Devices*. 1983, Dublin: Bole.
15. Rafferty, C.S., M.R. Pinto, and R.W. Dutton, Iterative methods in semiconductor-device simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1985. 32(10): p. 2018–2027.
16. Bank, R.E., D.J. Rose, and W. Fichtner, Numerical-methods for semiconductor-device simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1983. 30(9): p. 1031–1041.
17. Laux, S.E. and K. Hess, Revisiting the analytic theory of p–n junction impedance: Improvements guided by computer simulation leading to a new equivalent circuit. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1999. 46(2): p. 396–412.
18. Burgler, J.F., et al., A new discretization scheme for the semiconductor current continuity equations. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1989. 8(5): p. 479–489.
19. Engl, W.L., H.K. Dirks, and B. Meinerzhagen, Device modeling. *Proceedings of the IEEE*, 1983. 71(1): p. 10–33.
20. Guo, J.Y. and C.Y. Wu, A new 2D analytic threshold-voltage model for fully depleted short-channel soi mosfets. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1993. 40(9): p. 1653–1661.
21. Meel, K., R. Gopal, and D. Bhatnagar, Three-dimensional analytic modelling of front and back gate threshold voltages for small geometry fully depleted SOI MOSFET's. *Solid-State Electronics*, 2011. 62(1): p. 174–184.
22. Rao, R., et al., Unified analytical threshold voltage model for non-uniformly doped dual metal gate fully depleted silicon-on-insulator MOSFETs. *Solid-State Electronics*, 2009. 53(3): p. 256–265.
23. Buturla, E.M., et al., Finite-element analysis of semiconductor devices: The FIELDAY program (Reprinted from IBM Journal of Research and Development, vol 25, 1981). *IBM Journal of Research and Development*, 2000. 44(1–2): p. 142–156.

24. Bochev, P., K. Peterson, and X. Gao, A new Control Volume Finite Element Method for the stable and accurate solution of the drift-diffusion equations on general unstructured grids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2013. 254: p. 126–145.
25. Pinto, M.R., et al., PISCES-IIB. 1985, Stanford Electronics Laboratories: Stanford CA 94305.
26. Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., *Numerical Recipes in C++: the Art of Scientific Computing*. 2002, Cambridge: Cambridge University Press.
27. Horio, K. and H. Yanai, Numerical modeling of heterojunctions including the thermionic emission mechanism at the heterojunction interface. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1990. 37(4): p. 1093–1098.
28. Yang, K.H., J.R. East, and G.I. Haddad, Numerical modeling of abrupt heterojunctions using a thermionic-field emission boundary-condition. *Solid-State Electronics*, 1993. 36(3): p. 321–330.
29. Grupen, M. and K. Hess, Simulation of carrier transport and nonlinearities in quantum-well laser diodes. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1998. 34(1): p. 120–140.
30. Piprek, J., Semiconductor optoelectronic devices. 2003, San Diego: Elsevier.
31. Coldren, L.A. and S.W. Corzine, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*. 1995, New York: Wiley.
32. Purbo, O.W., D.T. Cassidy, and S.H. Chisholm, Numerical-model for degenerate and heterostructure semiconductor-devices. *Journal of Applied Physics*, 1989. 66(10): p. 5078–5082.
33. Esquivias, I., et al., Carrier dynamics and microwave characteristics of GaAs-based quantum-well lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999. 35(4): p. 635–646.
34. De Mari, A., An accurate numerical steady-state one-dimensional solution of the p–n junction. *Solid-State Electronics*, 1968. 11(1): p. 33–58.
35. Ronnie, T.J.W., *Advances in High-Power Laser Diode Packaging, in Semiconductor Laser Diode Technology and Applications*, D.S. Patil, Editor. 1999, www.intechopen.com.
36. Polak, S.J., et al., Semiconductor-device modeling from the numerical point-of-view. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1987. 24(4): p. 763–838.
37. Scharfeter, D.I. and H.K. Gummel, Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1969. ED16(1): p. 64–77.
38. Frensley, W.R . Scharfetter-Gummel discretisation scheme for drift-diffusion equations. 2004; Available from: http://www.utdallas.edu/~frensley/minitech/ScharfGum.pdf.
39. Stewart, J., *Single Variable Calculus*. 2012, Pacific Grove, Calif.: Brooks/Cole Cengage Learning.
40. Malik, S.C. and S. Arora, *Mathematical Analysis*. 2010, New Delhi: New Age International Publishers.
41. Gummel, H.K., A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *IEEE Transactions. on Electron Devices*, 1964. 11(10): p. 455–465.
42. Mock, M.S., Convergence of Gummels numerical algorithm. *Solid-State Electronics*, 1972. 15(1): p. 1–4.
43. Chin, S.P. and C.Y. Wu, A new methodology for 2-dimensional numerical-simulation of semiconductor-devices. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 1992. 11(12): p. 1508–1521.
44. Perng, R.K., P.S. Lin, and C.Y. Wu, A new methodology for developing a fast 2-dimensional mosfet device simulator. *Solid-State Electronics*, 1991. 34(6): p. 635–647.
45. Bank, R.E. and D.J. Rose, Global approximate newton methods. *Numerische Mathematik*, 1981. 37(2): p. 279–295.

46. Bank, R.E. and D.J. Rose, Parameter selection for newton-like methods applicable to non-linear partial-differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1980. 17(6): p. 806–822.
47. Bulashevich, K.A., et al., Simulation of visible and ultra-violet group-III nitride light emitting diodes. *Journal of Computational Physics*, 2006. 213(1): p. 214–238.
48. El Boukili, A. and A. Marrocco, Arclength continuation methods and applications to 2D drift-diffusion semiconductor equations. 1995, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique. p. 1–100.
49. Perng, R.K. and C.Y. Wu, A new algorithm for steady-state 2-D numerical-simulation of mosfets. *Solid-State Electronics*, 1990. 33(2): p. 287–293.
50. Akcasu, O.E., Convergence properties of newton method for the solution of the semiconductor transport-equations and hybrid solution techniques for multidimensional simulation of vlsi devices. *Solid-State Electronics*, 1984. 27(4): p. 319–328.
51. Smith, G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Method*. 1988, Oxford: Oxford University Press.
52. Bank, R.E., et al., Transient simulation of silicon devices and circuits. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1985. 32(10): p. 1992–2007.
53. Mukherjee, J. and J.G. McInerney, Electrothermal analysis of CW high-power broad-area laser diodes: A comparison between 2-D and 3-D Modeling. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2007. 13(5): p. 1180–1187.
54. Szymanski, M., Two-dimensional model of heat flow in broad-area laser diode: Discussion of the upper boundary condition. *Microelectronics Journal*, 2007. 38(6–7): p. 771–776.
55. Szymanski, M., et al., Two-dimensional model of heat flow in broad-area laser diode mounted to a non-ideal heat sink. *Journal of Physics D-Applied Physics*, 2007. 40(3): p. 924–929.
56. Nakwaski, W. and M. Osinski, On the thermal resistance of vertical-cavity surface-emitting lasers. *Optical and Quantum Electronics*, 1997. 29(9): p. 883–892.
57. Nakwaski, W. and M. Osinski, Thermal-properties of etched-well surface-emitting semiconductor-lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(6): p. 1391–1401.

第 7 章　光纤放大器和激光器

掺杂镧系离子的光纤器件有若干应用。商业光纤激光器的波长范围从可见光到 2μm，而各实验室研究也陆续开发出了中红外光纤激光器。对比其他类型的激光器，光纤激光器的输出光束质量较高，光束传递易于实现。除了光纤激光器之外，光纤放大器格外重要，这类器件在长距离通信系统中扮演者信号中继者的重要作用。

在本章中，我们会讨论镧系离子掺杂光纤放大器和激光器。我们将从 7.1 节光子和原子相互作用的一般理论开始，然后在 7.2 节继续讨论镧系离子的电子能级建模。在 7.3 节，我们会推导描述掺镧离子介质光放大过程的方程，并介绍适合处理光放大方程求解问题的数值方法。在 7.4 和 7.5 节，我们将会对既有理论进行扩展，讨论光纤激光器的建模和时域分析。在 7.6 节，我们将讨论实验法获取建模参数。阅读这一节的读者需要熟悉掺镧光纤激光器和放大器的基本原理[1-3]。

7.1　光子和原子

光和原子的相互作用有三个过程：自发激发、受激激发和吸收（见图 7.1）。在受激吸收的过程中，一个原子从高能级跃迁到低能级，释放的能量不等于光子能量 $h\nu$，其中 ν 为光子频率，h 为普朗克常数。一个原子自发发射光子的概率密度，在单位时间内为 $P=1/\tau_{sp}$，其中自发寿命 τ_{sp}时一个可从实验中获得的参数。当一个光子通量 φ ［光子/$cm^2\cdot s$］照射在一个原子上时，受激发射或吸收的概率密度为 $W=\varphi\sigma(\nu)$，其中光子频率 $\sigma(\nu)$的函数以单位面积计，因此它表示了跃迁横截面。与自发寿命相类似，跃迁横截面一般也可以通过实验测得。有关光子 - 原子相互作用计数的更详细的只是可以参考 Saleh 和 Teich[4]。

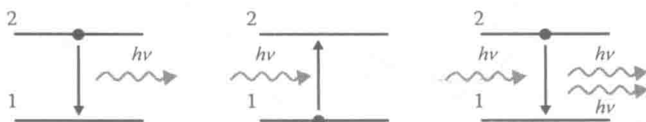


图 7.1　原子能级和光子能量 $h\nu$ 的相互作用

当受激发射的概率密度已知时，就可以推导出描述受激发射光放大过程的方程。我们考虑一个横截面面积为 A 的圆柱（见图 7.2）。

光子通量 φ 从圆柱的左侧射入通过厚度为 dz 的区域。由介质的相互作用，通

过受激发射过程，圆柱区域右侧射出的光子通量增加了 $d\varphi$。根据粒子数守恒，圆柱区域 dz 在单位时间内产生的光子数应该等于单位时间内离开该区域的光子数。圆柱区域内的原子数等于 $NAdz$，其中 N 为介质单位体积内通过受激发射产生光子的原子数。所以，在圆柱区域单位时间产生的光子数，应该等于圆柱区域内激发的原子数与受激发射概率密度 W 的乘积。因为圆柱区域长度比宽度小很多。所以我们可以忽略光子从圆柱区域侧面的泄漏，所以单位时间内离开圆柱区域的光子数，等于总光子通量减去通过面积 A 的光子通量，即 $d\varphi A$。然后让它等于产生的光子数，写出方程：

$$NWAdz = d\phi A \tag{7.1}$$

将 $W=\varphi\sigma(\nu)$ 代入式（7.1），可以得到如下描述受激发射放大过程的光子通量方程：

$$\frac{d\phi(z)}{dz} = N\sigma(\nu)\phi(z) \tag{7.2}$$

式（7.2）明确表示了光子通量与 z 以及某频率的跃迁横截面之间的关系。如果我们考虑两个能级的差等于光子能量（见图 7.1），则单位体积内可受激发射的原子数等于单位体积内能级 2 上的原子数，我们将其记作 N_2。由于与处理受激发射的步骤相同，我们可以看到式（7.2）也可以表示受激吸收。其中 N 为单位时间受激吸收的单位体积内的原子数。同样，在图 7.1 所示的两个能级系统的情况中，单位体积内受激吸收的原子数等于单位体积内能级 1 的原子数，我们将其记做 N_1。最后，我们可以得到，光通量与两个能级（见图 7.1）的相互作用，可以用包含净增益 $\gamma(\nu)=(N_2-N_1)\sigma(\nu)$ 的方程表示：

$$\frac{d\phi(z)}{dz} = (N_2-N_1)\sigma(\nu)\phi(z) = \gamma(\nu)\phi(z) \tag{7.3}$$

方程（7.3）显示，只有 $N_2>N_1$ 时才存在净增益。不过，在热平衡下，因为能级布局遵从玻尔兹曼分布，所以相反的条件也可以满足。因而需要能级反转。

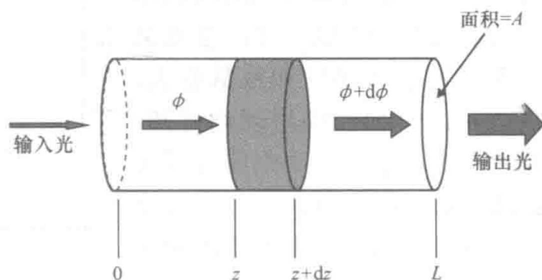


图 7.2　受激发射过程中的光子通量放大

在用方程（7.3）计算光子密度分布之前，我们还需要知道在能级 1 和能级 2 上原子单位体积浓度内的空间分布。这些原子浓度一般可以用速率方程法求得。我们在前面的章节中已经讨论过激光器二极管的速率方程。因此在这里我们直接引用这一方法。我们将以 Saleh 和 Teich[4] 中的实例进行演示。这一能级系统中包含两个能级（见图 7.3）。

较高的能级的泵浦率为 R_2，而较低能级的耗尽率为 R_1。在两个能级间存在受激发射和吸收的过程。较高能级同样会由于自发发射到能级 1 的过程而出现耗尽，

其时间常数为 τ_{21}。而到所有更低能级的时间常数为 τ_{20}。两个过程可以合并在一起，用一个时间常数 τ_2 表示。较低能级同样会由于自发发射到更低能级而出现耗尽，它的时间常数为 τ_1。所以我们可以得到能级 1 和 2 的原子浓度变化的速率方程。能级 2 的原子浓度变化率，$\mathrm{d}N_2/\mathrm{d}t$，正比于外泵浦率 R_1，而受激吸收率（这些项因此取正）反比喻受激发射和合并自发发射率（因此去负）：

$$\frac{\mathrm{d}N_2}{\mathrm{d}t}=R_2+N_1W-N_2W-\frac{N_2}{\tau_2} \tag{7.4a}$$

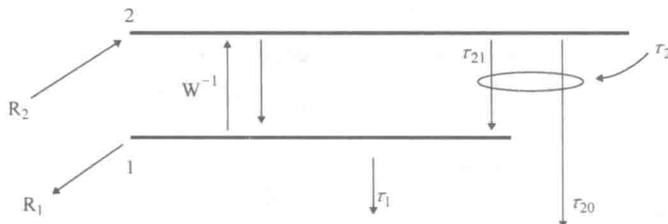


图 7.3　双能级系统以 R_2 泵浦到高能级以及以 R_1 耗尽到低能级的示意

同样，我们可以写出能级 1 的原子浓度变化率 $\mathrm{d}N_1/\mathrm{d}t$：

$$\frac{\mathrm{d}N_1}{\mathrm{d}t}=\frac{N_2}{\tau_{21}}+N_2W-R_1-\frac{N_1}{\tau_1}-N_1W \tag{7.4b}$$

其中泵浦到能级 1 项为正，而能级 1 耗尽的项为负。如果速率 R_1 和 R_2 以及其他常数都已知，则方程（7.4）可解，从而可得方程（7.3）所需的 N_1 和 N_2 浓度。方程（7.4）的解与所有参数以及高能级泵浦与低能级耗尽的方式有很强的关联。这些参数又与所有其他能级属性和数量有关。由原子 - 光子相互作用理论可知，光泵浦系统至少需要 3 个能级以实现能级反转。所以所谓的三能级系统是实现光放大和激光器的最简单能级系统。图 7.4 所示为三能级系统的示意图。

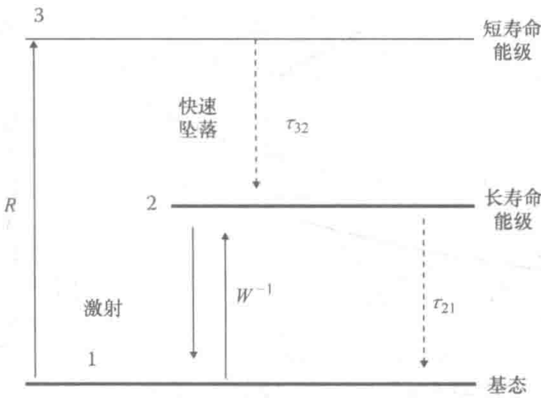


图 7.4　泵浦率为 R 的三能级系统示意图

光子能量等于能级 1 到能级 3 的能量差的泵浦率为 R。从能级 3，原子通过辐射和非辐射过程快速的跌落到能级 2（所以这一跃迁过程用虚线箭头表示）。三能级系统的关键问题是从能级 3 到能级 2 的跌落快于从能级 2 到能级 1 的自发发射和辐射跌落速率。如果满足这一条件，能级 1 和能级 2 就可以实现能级反转，从而可以实现相应波长的激射。

三能级系统有一个主要的缺点，来自于能级反转需要考虑到基态。在热平衡下，存在一个强基态，所以需要很强的泵浦才能实现能级反转。为了减小所需的泵浦激光功率，出现了四能级系统（见图 7.5）。在四能级系统中，能级 1 和能级 2 存在反转（见图 7.5），即高能级和非基态能级之间存在反转。所以，较低的泵浦功率就可以实现反转。不过，四能级系统一般很难在现实中实现。它需要能级 4 一部分快速消失，从而有效地将原子从较低能级 1 激发出来，容易实现和维持能级反转。在下一节中，我们将研究铒离子掺杂的硅玻璃三能级系统如何实现能级反转。

图 7.5　泵浦率为 R 的四能级系统示意图

最后，我们由图 7.2，从现象上推导光子通量密度和光导引模的光子密度之间的关系。严格的推导过程，请参考 Ebeling[5] 的第 4 章。首先，我们考虑在长度为 L、横截面为 A 的圆柱区域内所含的光子，以群速度 v_g 传播（见图 7.2）。则圆柱内含有的光子总数等于 N_pLA，其中 N_p 为光子密度。另外，我们可以由光子通量 φ 计算出圆柱内光子总数，即 $\varphi AL/v_g$。让这两个光子总数相等，构成如下方程：

$$N_pLA = \varphi AL/v_g \tag{7.5}$$

由 7.5，可立刻得到

$$N_p = \frac{\varphi}{v_g} \tag{7.6}$$

方程（7.6）给出了光子通量和光子密度之间的关系。

7.2　掺铒离子硅玻璃光纤

掺铒硅玻璃光纤用于长波光通信系统中的光放大器，其工作波长接近 1.55μm。铒在硅玻璃以三价离子，Er^{3+} 存在。铒的原子系数为 68，它的电子组态为 $1s^22s^2p^63s^2p^6d^{10}4s^2p^6d^{10}f^{12}5s^2p^66s^2$。当以三价离子形式存在时，铒原子失去 6s 壳层的两个电子，和 4f 壳层的一个电子。其他的壳层均充满电子，因此没有光活性[2]。所以，在基态组态，4f 壳层可与外界光场交换能量。4f 壳层的满态有 14 个电子。所以，Er^{3+} 缺少 3 个电子就可充满该壳层（请不要混淆充满 4f 的 3 个电子和铒原子组态缺少的 3 个电子）。由原子光谱学理论可知，在基态组态上，4f 壳层缺少 3 个电子会出现 364 种电子排列方式[6]。镧系离子的能级以罗素－桑德斯耦合标记[7]。在 Er^{3+} 中，4f 壳层有三种最低能级的符号分别是：$^4I_{11/2}$、$^4I_{13/2}$

和$^4I_{15/2}$[2]。我们可以从这些标记中轻松推导出 Er^{3+} 光致发光谱的特有能级，还可以在文献［7］中找到它的原子光谱。

图 7.6 所示为铒掺杂离子的最低能级示意图。

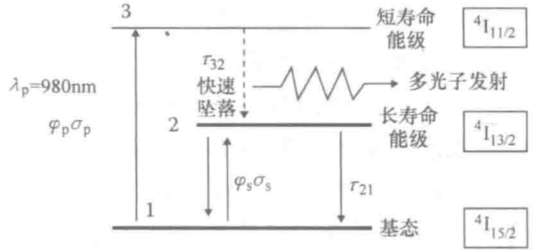


图 7.6 980nmEr^{3+}泵浦三能级系统示意图

$^4I_{11/2}$能级与基态之间的能级差对应了 980nm 的光子波长。这一波长的低成本的激光器大部分为 AlGaAs 材料。因此，实际可以容易实现光的有效泵浦。不仅如此，基态和$^4I_{13/2}$能级之间的能级差对应了 1550nm 的光子波长，这个波长是长程光通信系统的主要波长。另一个要点是，时间常数 τ_{32} 比 τ_{21} 小两个量级。这使得硅玻璃中的 Er^{3+} 离子，如传统三能级系统，可以在能级反转时实现足够强的泵浦（很容易实现）。两个时间常数相差较大的原因，是两个跃迁的物理过程不同。能级$^4I_{11/2}$和$^4I_{13/2}$之间的跃迁是非辐射跃迁。跃迁的能级差通过多声子发射过程传递给基质玻璃材料，从而使基质材料的温度上升（量子亏损）。而能级$^4I_{13/2}$和$^4I_{15/2}$之间的跃迁是辐射跃迁。这时，能量差通过自发发射过程传递给光子。硅玻璃中两种过程的比较研究请参考 Desurvire[8]。

按照上一节的思路，我们可以写出图 7.6 能级系统的速率方程：

$$\frac{dN_3}{dt} = -\frac{N_3}{\tau_{32}} + (N_1 - N_3)\varphi_p\sigma_p$$

$$\frac{dN_2}{dt} = -\frac{N_2}{\tau_{21}} + \frac{N_3}{\tau_{32}} - (N_2 - N_1)\varphi_s\sigma_s$$

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{N_2}{\tau_{21}} + (N_2 - N_1)\varphi_s\sigma_s - (N_1 - N_3)\varphi_p\sigma_p \tag{7.7}$$

式中，N_1、N_2 和 N_3 分别为能级$^4I_{15/2}$、$^4I_{13/2}$和$^4I_{11/2}$的原子体积密度。泵浦光子通量密度和相应的跃迁横截面分别为 φ_p 和 σ_p，在单波长的情况（~1550nm）下，它们分别为 φ_s 和 σ_s。常数 τ_{32} 和 τ_{21} 表示从能级$^4I_{11/2}$和$^4I_{13/2}$光至发光衰减的时间。

首先，考虑在泵浦和信号光子通量密度为常数时，求解方程（7.7）。这种情况时，能级粒子数并不随时间改变，而方程（7.7）左侧时间的导数等于零：

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{N_3}{\tau_{32}} + (N_1 - N_3)\varphi_p\sigma_p \\ 0 &= -\frac{N_2}{\tau_{21}} + \frac{N_3}{\tau_{32}} - (N_2 - N_1)\varphi_s\sigma_s \\ 0 &= \frac{N_2}{\tau_{21}} + (N_2 - N_1)\varphi_s\sigma_s - (N_1 - N_3)\varphi_p\sigma_p \end{aligned} \tag{7.8}$$

方程（7.8）是线性相关的。因此，已知信号和泵浦光子通量值求解这个方

程，无法得到三个能级原子分布的唯一解。我们需要另一个方程构成方程组，才能求出唯一解。观察可知，在所有能级的原子密度的总和应该等于硅玻璃基质中 Er^{3+} 离子总浓度，由此得到另一个方程。只考虑三能级系统，则有 $N_1+N_2+N_3=N$，其中 N 为铒总掺杂浓度。代入方程（7.8），可以得到如下方程组：

$$\left.\begin{aligned} &\frac{N_3}{\tau_{32}}+(N_1-N_3)\varphi_p\sigma_p=0 \\ &-\frac{N_2}{\tau_{21}}+\frac{N_3}{\tau_{32}}-(N_2-N_1)\varphi_s\sigma_s=0 \\ &N_1+N_2+N_3=N \end{aligned}\right\} \tag{7.9}$$

它具有唯一解。注意，因为上转换过程，方程组（7.9）的最后一个方程只对中等泵浦功率水平，和中等铒离子掺杂浓度成立（有关这个问题更详细的讨论，请参考本章最后一节）。

代数方程组（7.9）趋于数字病态。因此，需要在典型参数范围内用解析近似法求解。在本节下面的部分中，我们将根据文献［2］推导近似算法。

首先，由其他两个方程消除第一个方程中的 N_3：

$$\left.\begin{aligned} &-\frac{N_2}{\tau_{21}}+\frac{1}{\tau_{32}}N_1\frac{\varphi_p\sigma_p}{1/\tau_{32}+\varphi_p\sigma_p}-(N_2-N_1)\varphi_s\sigma_s=0 \\ &N_1+N_2+N_1\frac{\varphi_p\sigma_p}{1/\tau_{32}+\varphi_p\sigma_p}=N \end{aligned}\right\} \tag{7.10}$$

由此，我们将方程减少为两个。下面，我们计算当方程组（7.10）中 τ_{32} 趋近于零时，有

$$\left.\begin{aligned} &-\frac{N_2}{\tau_{21}}+N_1\varphi_p\sigma_p-(N_2-N_1)\varphi_s\sigma_s=0 \\ &N_1+N_2=N \end{aligned}\right\} \tag{7.11}$$

因为在典型工作条件下，和其他参数相比，τ_{32} 非常小，所以这个方程是正确的。由方程组（7.11），我们可以很容易得到 N_1 和 N_2：

$$\begin{aligned} N_1&=N\frac{1/\tau_{21}+\varphi_s\sigma_s}{1/\tau_{21}+2\varphi_s\sigma_s+\varphi_p\sigma_p} \\ N_2&=N\frac{\varphi_p\sigma_p+\varphi_s\sigma_s}{1/\tau_{21}+2\varphi_s\sigma_s+\varphi_p\sigma_p} \end{aligned} \tag{7.12}$$

因为 τ_{32} 非常小，我们可以放心的假设 $^4I_{11/2}$ 能级消失得非常快，因此 $N_3=0$。所以，我们可以得到以下能级差的近似式：

$$\begin{aligned} N_3-N_1&=-N_1=-N\frac{1/\tau_{21}+\varphi_s\sigma_s}{1/\tau_{21}+2\varphi_s\sigma_s+\varphi_p\sigma_p} \\ N_2-N_1&=N\frac{-1/\tau_{21}+\varphi_p\sigma_p}{1/\tau_{21}+2\varphi_s\sigma_s+\varphi_p\sigma_p} \end{aligned} \tag{7.13}$$

方程（7.13）可以在给定泵浦和信号光子通量下，计算能级粒子数。但是，这两个量对光纤放大器未知，所以需要以已知的入射泵浦和信号功率进行自洽计算。我们下面在下一节中讨论这个问题。

7.3 光纤放大器建模

在本节中，我们对光纤放大器进行建模，并详细讨论其软件实现。光纤放大器有两个基本配置：同向传播泵浦配置（如图7.7a所示）和相向传播泵浦配置（如图7.7b所示）。我们重点关注同向传播泵浦配置。在这种配置中，信号和泵浦光束在光纤的一混合在一起，入射进长度为L的镧系离子掺杂光纤。在本节中，我们首先推导方程，然后阐述光束在镧系掺杂介质中的传播，随后我们将求解掺铒光放大器的方程。在第二小节，我们将讨论如何处理放大器的自发发射。

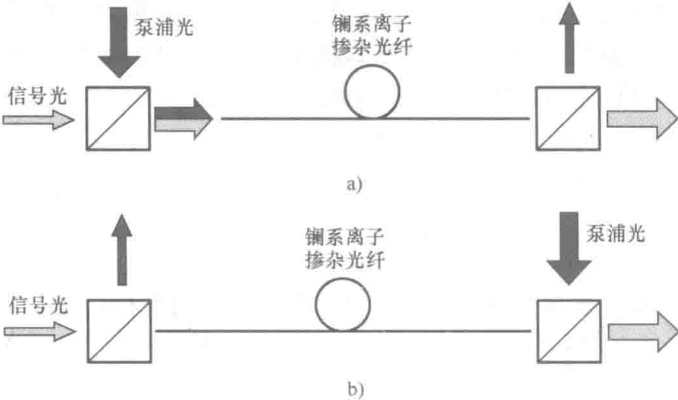


图7.7　镧系离子掺杂光纤放大器的示意图

a）同向传播　b）相向传播泵浦配置

7.3.1 同向和相向泵浦光放大器模型

在本小节中，我们考虑可以计算泵浦和放大信号功率分布的光纤放大器模型。为了计算沿光纤的光通量分布，首先，我们需要推导镧系介质内光传播的方程。考虑一个掺杂镧系离子的阶梯折射率分布的圆光纤，其有包层和芯区的折射率差较小的优点，所以可以应用标量近似计算。此外，我们假设掺杂镧系离子硅玻璃的增益，对光纤折射率分布为$n(x, y)$只有很小的扰动$\Delta n(x,y)$[3,9]，基模的泵浦和信号传输没有扰动。然后，我们可以用积的形式表示场分布：$\Psi(x,y,z)=A(z)*F(x,y)*e^{j(\omega t-\beta z)}$，其中$F(x,y)$为无扰动波导的基模分布，$A(z)$为$z$的缓变函数，$\beta$是基模传播常数。为了单独定义$\Psi(x,y,z)$，我们引入$F(x,y)$满足条件：$\iint F^*(x,y)F(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y=I_N$，其中“*”为共轭标记，$I_N$为归一化常数，它假设

可取任意值，例如取 1。我们将 $\Psi(x,y,z)$ 代入标量波动方程（2.1），得到

$$-2\mathrm{j}\beta\frac{\mathrm{d}A(z)}{\mathrm{d}z}F(x,y)+k_0^2(2n\Delta n)A(z)F(x,y)=0 \tag{7.14}$$

式中，k_0 为波数。在式（7.14）中，我们忽略了缓变函数 A 的二阶导数，则对基模分布 $F(x,y)$ 有

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 F}{\partial y^2}+(k_0^2n^2-\beta^2)F=0,$$

比较 $2n\Delta n$，可忽略 Δn^2。然后，我们将式（7.14）乘以 F^*，并对横截面做积分。因为 $F^*(x,y)F(x,y)$ 的积分可以归一化为 I_N，所以我们可得

$$I_\mathrm{N}\frac{\mathrm{d}A(z)}{\mathrm{d}z}=-\mathrm{j}k_0I_\mathrm{N}\overline{\Gamma}A(z) \tag{7.15}$$

其中 $\overline{\Gamma}$ 定义如下：

$$\overline{\Gamma}=\frac{k_0}{\beta}\iint F^*(x,y)n\Delta nF(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_\mathrm{N}$$

然后，我们确定折射率分布：$\Delta n=\Delta n_\mathrm{R}+\mathrm{j}\Delta n_\mathrm{i}$ 的虚部 Δn_i 和实部 Δn_R，并将 $\overline{\Gamma}$ 分为实部和虚部：

$$\overline{\Gamma}_\mathrm{R}=\frac{k_0}{\beta}\iint F^*(x,y)n\Delta n_\mathrm{R}F(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_\mathrm{N}$$

$$\overline{\Gamma}_\mathrm{I}=\frac{k_0}{\beta}\iint F^*(x,y)n\Delta n_\mathrm{I}F(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_\mathrm{N}$$

所以式（7.15）可变为

$$I_\mathrm{N}\frac{\mathrm{d}A(z)}{\mathrm{d}z}=-\mathrm{j}k_0I_\mathrm{N}(\overline{\Gamma}_\mathrm{R}+\mathrm{j}\overline{\Gamma}_\mathrm{I})A(z) \tag{7.16}$$

由表 3.3，我们可以得到 Ψ 和光子通量 φ 之间的关系，以及总功率 P：

$$P=\iint\Psi^*\Psi\mathrm{d}x\mathrm{d}y=A^*AI_\mathrm{N} \tag{7.17a}$$

$$\varphi=\Psi^*\Psi/h\nu=A^*AF^*F/h\nu=PF^*F/(I_\mathrm{N}h\nu) \tag{7.17b}$$

将式（7.16）乘以 A 的复共轭 A^*，再将两个方程相加，我们可以得到波导导引功率演进的方程：

$$\frac{\mathrm{d}P(z)}{\mathrm{d}z}=2k_0\overline{\Gamma}_\mathrm{I}P(z) \tag{7.18}$$

如果标量场局部在 z 方向按 $\exp[-\mathrm{j}k_0(n+\Delta n_\mathrm{R}+\mathrm{j}\Delta n_\mathrm{I})]$ 变化，而功率按 $\exp(g_\mathrm{m}z)$ 变化，其中 g_m 为材料增益，则由式（7.17b），有 $\Delta n_\mathrm{I}=g_\mathrm{m}/(2k_0)$。所以，式（7.18）可以变为

$$\frac{\mathrm{d}P(z)}{\mathrm{d}z}=\hat{\Gamma}P(z) \tag{7.19a}$$

其中

$$\hat{\Gamma} = \frac{k_0}{\beta}\iint F^*(x,y) n g_m F(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y / I_N \tag{7.19b}$$

在铒掺杂放大器中，泵浦光与信号光相互作用，由式（7.19），可以得到两个方程的方程组：

$$\frac{\mathrm{d}P_s(z)}{\mathrm{d}z} = \hat{\Gamma}_s(z) P_s(z) \tag{7.20a}$$

$$\frac{\mathrm{d}P_p(z)}{\mathrm{d}z} = \hat{\Gamma}_p(z) P_p(z) \tag{7.20b}$$

其中

$$\hat{\Gamma}_s(z) = \frac{k_0}{\beta}\iint F_s^*(x,y) n(x,y,z)\sigma_s(N_2(x,y,z) - N_1(x,y,z)) F_s(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y / I_N \tag{7.21a}$$

$$\hat{\Gamma}_p(z) = \frac{k_0}{\beta}\iint F_p^*(x,y) n(x,y,z)\sigma_p(N_3(x,y,z) - N_1(x,y,z)) F_p(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{7.21b}$$

在式（7.20）和式（7.21）中，我们定义了所有函数变量，以方便理解后续的讨论。为了联立式（7.20）、式（7.21）和式（7.13），我们需要光子通量和功率之间的关系。这个关系可以直接由式（7.17b）得到：

$$\varphi_s = P_s(F_s^* F_s)/(I_N h\nu_s) \tag{7.22a}$$

$$\varphi_p = P_p(F_p^* F_p)/(I_N h\nu_p) \tag{7.22b}$$

由此，方程（7.20）可以和方程（7.21）、方程（7.13）联立，求解信号以及泵浦功率在光纤放大器中的纵向分布。为了构成一个完备的方程组，从而可以自洽求解，方程（7.20）还需要补充计算离子能级 N_1 和 N_2 的方程组。对铒掺杂，泵浦光为980nm的情况，可以用方程（7.13）计算这两个量。

如果我们将铒离子掺杂硅玻璃光纤放大器作为特例，则方程（7.13）和方程（7.20）组成的完备方程组可以自洽求解。为了得到方程（7.13）和方程（7.20）的数值解法，我们下面推导M段光纤的情况，如图7.8所示。

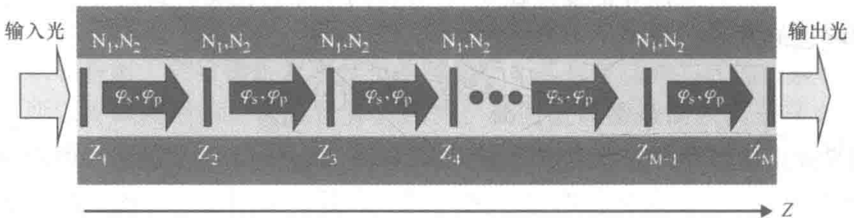


图7.8 纵向离散

在计算机内存中，我们只存储了离散点 z_1、z_2 等的能级粒子数和光子通量密度的值。我们首先考虑了一个信号光和泵浦光同向传播的光纤放大器（见图7.7a）。然

后，我们假设光纤的末端镀了高透膜，所以光纤 - 空气界面的反射波很小，可以忽略不计。基于这样的假设，可以从已知的入射泵浦和信号功率，计算出光纤放大器光纤末端，即 $z=0$ 时的泵浦和信号光功率分布（见图 7.7a）。如果泵浦和信号功率对 z 的一阶导数可以用正向有限差分近似，则可以得到算法 7.1。

算法 7.1　同向泵浦配置的 1D 铒掺杂光纤放大器模型

1. 开始；
2. 设置所有参数的值；
3. 计算纵向步长 Δz；
4. 设置横向计算窗口尺寸；
5. 设置入射泵浦和信号光功率；
6. 计算泵浦光和信号光波长额的基模分布；
7. 由式（7.22）计算入射泵浦和信号光子通量；
8. 初始化 z：$z=0$；
9. 由式（7.13）计算当前横向位置 z 和 N_1、N_2 能级分布
10. 由式（7.21）计算增益系数的横向分布
11. 由式（7.20）计算 $z+\Delta z$ 处额的泵浦和信号光功率
12. 更新 z：$z=z+\Delta z$ 的值；
13. 如果 $z=L$，则跳转到步骤 15；
14. 跳转到步骤 9；
15. 停止。

以下为算法 7.1 的 MATLAB 程序。

```
% erbium doped fibre amplifier co-propagating pump
% using the full calculation of transverse photon flux
% distribution

clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e
% initial constants
i = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;

fiber_scalar_beta_s

scalar_fibre_plot1D

FF_s = f.*f;

fiber_scalar_beta_p

scalar_fibre_plot1D
```

```
FF_p = f.*f;

subplot(3,1,1)

r = r*1e-4;% converting microns to cm for radius
a = a*1e-4;% and fibre radius

plot(r,FF_s,'b',r,FF_p,'r')

xlabel('r/micrometers','Fontsize',12)
ylabel('Intensity/a.u.','Fontsize',12)

h = 6.626e-34;%[Js]
v0 = 3e10;%[cm/s]
q = 1.609e-19;%[C]
sig_p = 2.7e-21;% pump absorption cross section [cm2]
sig_s = 7e-21;% signal emission cross section [cm2]
N = 0.7e19;% erbium ion concentration [1/cm3]
L = 1500;% amplifier length [cm]
R =.5e-4;% doping radius [cm]
if R > a
'doping radius larger than fibre core radius'
end
r_mask = r < R;% radius mask for integral calculation
dr = r(2)-r(1);% sampling step for integral calculation
A = pi*R*R;

gamma_s = sum(r_mask.*r.*FF_s)/(sum(r.*FF_s));
gamma_p = sum(r_mask.*r.*FF_p)/(sum(r.*FF_p));

lamp = 0.98e-4;% pump wavelength[cm]
lams = 1.53e-4;% signal wavelength[cm]
freqp = v0/lamp;%[1/s]
freqs = v0/lams;%[1/s]
tau21 = 9e-3;%[s]
Pp_ini = 0.05;%pump power [W]
Ps_ini = 1.e-6;%signal power [W]

% iteration loop
N_of_zsecs = 10000% number of z sections
dL = L/N_of_zsecs;% z step
z_pos = dL*(1:1:N_of_zsecs);

Ps = Ps_ini*ones(1,N_of_zsecs);
%initial signal wave relative intensity
Pp = Pp_ini*ones(1,N_of_zsecs);
%initial pump wave relative intensity

for k = 1:N_of_zsecs-1
Fi_s = Ps(k)*FF_s/((h*freqs)*2*pi*dr*sum(r.*FF_s));
Fi_p = Pp(k)*FF_p/((h*freqp)*2*pi*dr*sum(r.*FF_p));
```

```
mian = sig_p*Fi_p+2*sig_s*Fi_s+1/tau21;
N2mN1 = (sig_p*Fi_p-1/tau21).*r_mask*N./mian;
N3mN1 = -(sig_s*Fi_s+1/tau21).*r_mask*N./mian;
Gam_s = nc*sum(sig_s*N2mN1.*r.*FF_s)/(nin*sum(r.*FF_s));
Gam_p = nc*sum(sig_p*N3mN1.*r.*FF_p)/(nin*sum(r.*FF_p));
Ps(k+1) = Ps(k)+dL*Gam_s*Ps(k);
Pp(k+1) = Pp(k)+dL*Gam_p*Pp(k);
end
```

程序使用了三个外部文件：fiber_scalar_beta_s.m，fiber_scalar_beta_p.m 和 scalar_fibre_plot1D.m。下面给出了 fiber_scalar_beta_s.m 和 scalar_fibre_plot1D.m 的代码。fiber_scalar_beta_p.m 计算了泵浦波长的传播常数，程序只需将 fiber_scalar_beta_s.m 中的信号波长改为泵浦波长即可。

fiber_scalar_beta_s.m 的内容如下：

```
% calculating beta for signal wavelength

lam = 1.53;%wavelength [micrometers]
nf = 1.45;
% refractive index in core IMAGINARY PART MUST BE ZERO!
nc = 1.44;% refractive index in cladding

a = 3.45;% waveguide radius [micrometers]

% calculation parameters
k = 2.0*pi/lam;% wavenumber
V = a*k*sqrt(nf^2-nc^2);% normalised frequency V
mode_order = 0;% LP mode order

% Calculation of initial interval locating B for bisection
% method
b = (0.00199999:0.001:0.9999999);
% Dispersion equation
u = sqrt(1.0-b)*V;
w = sqrt(b)*V;
DE = u.*besselj(mode_order+1,u)./besselj(mode_order,u)-...
w.*besselk(mode_order+1,w)./besselk(mode_order,w);

% precise location of B
length = size(b);
for j = length(2):-1:2 % size produces a 2 el. vector with
% first element being vert dim and second long dim hence
% length(2) not length
   if DE(j)/DE(j-1)<0
      break
   end
end


btop = b(j);
bbot = b(j-1);
```

```
jbrowse = j-1;
utop = sqrt(1.0-btop)*V;
wtop = sqrt(btop)*V;
ubot = sqrt(1.0-bbot)*V;
wbot = sqrt(bbot)*V;

% bisection method for root finding starting from the initial
% interval calculated above
DEtop = utop*besselj(mode_order+1,utop)/besselj…
(mode_order,utop)-wtop*besselk(mode_order+1,wtop)…
/besselk(mode_order,wtop);
DEbot = ubot*besselj(mode_order+1,ubot)/besselj…
(mode_order,ubot)-wbot*besselk(mode_order+1,wbot)…
/besselk(mode_order,wbot);
jmax = 100; % maximum number of bisections
tolerance = 0.000000000001; % tolerance for finding B

for j = 1:jmax
    bcen = (btop-bbot)/2+bbot;
    ucen = sqrt(1.0-bcen)*V;
    wcen = sqrt(bcen)*V;
    DEcen = ucen*besselj(mode_order+1,ucen)/besselj…
    (mode_order,ucen)-wcen*besselk(mode_order+1,wcen)…
    /besselk(mode_order,wcen);

    if abs(DEcen) < 1.d-15%added to avoid division by nearly zero
       break
    end

    if DEtop/DEcen > 0
       btop = bcen;
       DEtop = DEcen;
       else
       bbot = bcen;
       DEbot = DEcen;
    end

    delta = btop-bbot;
    if delta < tolerance
       break
    end
end

%end of bisection method loop

% checks for tolerance
if j = =jmax
    disp('maximum number of bisections exceeded before…
    reaching tolerance')
end

if jbrowse = =1
```

```
% disp('no zero found')
   out = 0;
else
   out = bcen;
end
% variable 'out' stores the relative propagation constant B

nin = abs(sqrt(out*(nf*nf-nc*nc)+nc*nc));
% calculation of effective index
'V B neff beta'
[V out nin nin*k]% plotting results in one line
```

scalar_fibre_plot1D.m 的内容如下：

```
% program calculates 1D scalar potential distribution in a
% circ fibre using scalar approach

total_rad = 4*a;

u = sqrt(nf*nf*k*k-nin*nin*k*k);
v = sqrt(nin*nin*k*k-nc*nc*k*k);

B = 1;% B can be set to 1 while A needs to be calculated to
% impose%continuity
A = besselk(0,v*a)/besselj(0,u*a);

r1 = 0:0.00005:a;
f1 = A*besselj(0,u*r1);

r2 = a:0.00005:total_rad;
f2 = B*besselk(0,v*r2);

r = [r1 r2];
f = [f1 f2];

%normalisation for convenient plotting only

f = f/sqrt(f*f');
```

在算法的第9和第10步，需要计算 N_1、N_2 的分布，以及全横向计算窗口的增益系数。计算横向积分时，采用了长方形数值积分法则。该法则需要引入足够密集的横向网格。光子通量密度以及粒子数横向分布的储存和计算，消耗计算机内存和计算时间。但当光纤以恒定浓度掺杂，且掺杂区半径 R 较小时，可以假设泵浦和信号光子通量，以及 N_1 和 N_2 在掺杂区内近似为常数。由此，还可以假设增益系数分布式（7.21）在掺杂区内平坦分布。基于以上假设，增益分布在镧系离子掺杂区 A 内与 x 和 y 无关，而在掺杂区外等于零。因为掺杂区内的折射率恒等于 n_c，所以可将其从式（7.19b）的积分符号中提到外面，所以式（7.19a）化简为

$$\frac{dP(z)}{dz} = \frac{n_c k_0}{\beta}\Gamma g_m(z)P(z) = \Gamma g_m(z)P(z) \tag{7.23}$$

式中，Γ 为约束因子：

$$\Gamma = \iint_A F^*(x,y)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{7.24}$$

我们注意到，对圆形阶梯折射率光纤，如果掺杂区 A 是一个半径为 R 的圆，则约束因子的计算可以根据基模光强度分布的对称性，化简为

$$\Gamma = \int_{r=0}^{r=R} F^*(r)F(r)r\mathrm{d}r \Big/ \int_{r=0}^{r=\infty} F^*(r)F(r)r\mathrm{d}r$$

式中，r 为半径坐标：$r=\sqrt{x^2+y^2}$。再假设，如果泵浦光只和单一信号光相互作用，则对泵浦功率 P_p 和信号功率 P_s，由方程（7.23）可得

$$\frac{\mathrm{d}P_\mathrm{s}(z)}{\mathrm{d}z} = \Gamma_\mathrm{s}\sigma_\mathrm{s}[N_2(z)-N_1(z)]P_\mathrm{s}(z) \tag{7.25a}$$

$$\frac{\mathrm{d}P_\mathrm{p}(z)}{\mathrm{d}z} = \Gamma_\mathrm{p}\sigma_\mathrm{p}[N_3(z)-N_1(z)]P_\mathrm{p}(z) \tag{7.25b}$$

式中，N_1、N_2 和 N_3，基于以上假设，只与纵向位置有关。为了推导出算法，我们需要联立式（7.25）和式（7.13）。文献中标准的做法，是由

$$\varphi_{\mathrm{s'const}} = \Gamma_\mathrm{s}P_\mathrm{s}/(Ah\nu_\mathrm{s}) \tag{7.26a}$$

$$\varphi_{\mathrm{p'const}} = \Gamma_\mathrm{p}P_\mathrm{p}/(Ah\nu_\mathrm{p}) \tag{7.26b}$$

计算芯区的光子通量密度常数。

对铒掺杂、泵浦光为980nm的系统，可通过式（7.13），代入 φ_s 和 φ_p 的值，直接计算粒子数 N_1、N_2 和 N_3。为了完善推导，我们注意到，对式（7.22）做积分可以得到式（7.26）。因此，首先我们对式（7.22）的右侧（RHS），在全横平面做积分：

$$RHS = P_\mathrm{s}/(h\nu_\mathrm{s})$$

同样，对左侧（LHS）做积分为

$$LHS = \iint \varphi_\mathrm{s}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \iint \varphi_\mathrm{s}\mathrm{d}x\mathrm{d}y \frac{\iint_A \varphi_\mathrm{s}\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\iint_A \varphi_\mathrm{s}\mathrm{d}x\mathrm{d}y} = \Gamma \iint_A \varphi_\mathrm{s}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \Gamma\varphi_\mathrm{s}(x=0,y=0)A$$

如果掺杂区 A 面积很小，光子通量密度分布在掺杂区相对平坦，则最后的近似很显然具有很高的精度。最后，计算 LHS 和 RHS 可以得到方程（7.26a）。同样，我们还可以得到方程（7.26b）。

方程（7.25）用于很多镧系掺杂光纤器件，以计算泵浦和信号光功率分布。同样的，对方程（7.20），需要计算离子能级粒子数的方程。

对掺杂铒的情况，方程（7.26）可以和方程（7.13）以及方程（7.22）联立，

构成两个常微分方程组成的方程组：

$$\frac{dP_s}{dz}=\frac{\dfrac{\sigma_p P_p \Gamma_p}{Ah\nu_p}-\dfrac{1}{\tau_{21}}}{\dfrac{\sigma_p P_p \Gamma_p}{Ah\nu_p}+2\dfrac{\sigma_s P_s \Gamma_s}{Ah\nu_s}+\dfrac{1}{\tau_{21}}}N\Gamma_s P_s \sigma_s$$

$$\frac{dP_p}{dz}=\frac{\dfrac{\sigma_s P_s \Gamma_s}{Ah\nu_s}+\dfrac{1}{\tau_{21}}}{\dfrac{\sigma_p P_p \Gamma_p}{Ah\nu_p}+2\dfrac{\sigma_s P_s \Gamma_s}{Ah\nu_s}+\dfrac{1}{\tau_{21}}}N\Gamma_p P_p \sigma_p \tag{7.27}$$

方程（7.27）由两个常微分方程构成，所以它的数值解的求解效率要比方程（7.20）和方程（7.13）联立的方程要高很多。而且，方程（7.27）可以用于阶梯折射率光纤，也可以用于光子晶体光纤，如果掺杂分布接近光纤中心，则可以使用标量近似。

此外，我们注意到，折射率微扰的实部和虚部满足 Kramers - Kroning 方程，不涉及方程（7.23）和方程（7.27）。这是因为在推导的开始，我们假设波导中以基模传播的光不存在扰动。换言之，我们假设了折射率扰动的实部，并不会对基模的横向场分布产生影响。需要注意的是，这种近似通常对经典芯 - 包层光纤成立，但是需要对微结构光纤谨慎使用。

为了完整性器件，我们验证方程（7.27）是否满足能量守恒定律。我们需要验证方程（7.27）中单位时间的光子数量。为此，我们推导方程（7.27）的左右两侧的光子能量，并将它们放在一起：

$$\frac{d\left(\dfrac{P_s}{h\nu_s}+\dfrac{P_p}{h\nu_p}\right)}{dz}=\frac{-\dfrac{1}{\tau_{21}}}{\dfrac{\sigma_p P_p \Gamma_p}{Ah\nu_p}+2\dfrac{\sigma_s P_s \Gamma_s}{Ah\nu_s}+\dfrac{1}{\tau_{21}}}N\left(\Gamma_s\frac{P_s}{h\nu_s}\sigma_s+\Gamma_p\frac{P_p}{h\nu_p}\sigma_p\right) \tag{7.28}$$

如果 τ_{21} 趋近无穷大，则方程（7.28）的左侧趋近于零，相当于忽略了自发发射。所以，如果忽略方程（7.13）中的自发辐射，方程（7.27）满足能量守恒。

实际上，方程（7.27）不满足能量守恒会看起来很意外。不过，应该注意的是，方程（7.27）不满足能量守恒并不是数学建模中人为造成的，而是镧系离子光放大器物理过程对精度的反映。这是因为，方程（7.20）以及方程（7.25）描述的光方法过程没有包含进自发发射所致。

信号光和泵浦光同向传播，且忽略反射光情况下，方程（7.27）的数值解法如算法 7.2 所示。

算法 7.2 同向泵浦配置的 1D 铒掺杂光纤放大器模型

1. 开始；
2. 设置所有参数的值，包括式（7.24）的约束因子；
3. 计算纵向步长 Δz；
4. 设置入射泵浦和信号光功率；
5. 由式（7.26）计算泵浦和信号光的光子通量密度；
6. 初始化 z：$z=0$；
7. 由式（7.13）计算当前纵向位置 z 的能级分布；
8. 由式（7.27）计算的泵浦和信号功率；
9. 更新 z：$z=z+\Delta z$ 的值；
10. 如果 $z=L$，则跳转到步骤 12；
11. 跳转到步骤 7；
12. 停止。

执行算法 7.2 的 MATLAB 代码如下所示。与算法 7.1 相同的，我们用较简单的欧拉法求解常微分方程的数值积分。

```
% erbium doped fibre amplifier co-propagating pump

clear
format long e
pi = 3.141592653589793e+000;

h = 6.626e-34;%[Js]
v0 = 3e10;%[cm/s]
q = 1.609e-19;%[C]
sig_p = 2.7e-21;% pump absorption cross section [cm2]
sig_s = 7e-21;% signal emission cross section [cm2]
N = 0.7e19;% erbium ion concentration [1/cm3]
L = 1500;% amplifier length [cm]
gamma_p = 9.349790276669653e-001;
%confinement factor at pump wavelength
gamma_s = 8.191686995681956e-001;
%confinement factor at signal wavelength
R = 3.4e-4;% doping radius [cm]
A = pi*R*R;

lamp = 0.98e-4;% pump wavelength[cm]
lams = 1.53e-4;% signal wavelength[cm]
freqp = v0/lamp;%[1/s]
freqs = v0/lams;%[1/s]
tau21 = 9e-3;%[s]
Pp_ini = 0.05;%pump power [W]
Ps_ini = 1.e-6;%signal power [W]

% iteration loop
N_of_zsecs = 1000% number of z sections
```

```
dL = L/N_of_zsecs;% z step
z_pos = dL*(1:1:N_of_zsecs);

Ps = Ps_ini*ones(1,N_of_zsecs);
%initial signal wave relative intensity
Pp = Pp_ini*ones(1,N_of_zsecs);
%initial pump wave relative intensity

for k = 1:N_of_zsecs-1
Ss = sig_s*Ps(k)*gamma_s/(A*h*freqs);
Sp = sig_p*Pp(k)*gamma_p/(A*h*freqp);
mian = Sp+2*Ss+1/tau21;
Ps(k+1) = Ps(k)+dL*(Sp-1/tau21)*sig_s*Ps(k)*N*gamma_s/mian;
Pp(k+1) = Pp(k)-dL*(Ss+1/tau21)*sig_p*Pp(k)*N*gamma_p/mian;
end
```

比较算法7.1和7.2的MATLAB代码，可以立刻发现，使用简化方法可以减小所需的计算机内存和计算时间。我们用铒掺杂硅玻璃光纤放大器，长度为15m，均匀掺杂，掺杂半径在0.5到3.45μm之间变化，考察简化算法7.1的精度，和算法7.2做比较。泵浦工作在980nm波长，信号工作波长为1530nm。泵浦和信号光跃迁横截面分别为$2.7\times10^{-21}cm^2$和$7\times10^{-21}cm^2$[2]。我们假设对两个波长，芯区的折射率均为1.45，包层的折射率均为1.44。阶梯折射率圆光纤的半径为3.45μm，可以保证光纤在1.53nm波场为单模工作。泵浦光和信号光的约束因子分别为0.64和0.4。铒离子浓度为$0.7\times10^{19}/cm^3$。自发辐射寿命τ_{21}取实验测量的典型值，设等于9ms[2]。输入信号功率等于0.1μW，泵浦光功率为50mW。由掺杂浓度和截面的乘积，可得信号和泵浦增益的上限，信号光为0.049/cm，泵浦光为0.0189/cm。对信号和泵浦光，折射率微扰Δn的虚部分别为0.39×10^{-6}和-0.15×10^{-6}。这两个值远远小于典型阶梯折射率单模硅玻璃光纤的折射率比，所以可以确定Δn是折射率的微小扰动。在光子晶体光纤中，可以通过共掺杂，消除铒离子带来的折射率微扰对光纤导引性质的影响。

图7.9所示为输出信号功率P_{out}和放大器增益$10\log(P_{out}/P_{in})$与掺杂区半径之间的关系，其中P_{in}为输入信号功率。图中还表示了输出信号功率和增益的相对误差、约束因子，与掺杂半径之间的关系。计算中，横向离散化步长为0.0001μm，微分方程的积分的纵向步长为0.1500cm。相对误差分别由算法7.1和算法7.2计算结果的差的绝对值给出。如我们预期，当掺杂半径增大时，误差增大。对输出信号功率，如果掺杂半径大于3μm，对应了信号约束因子大于0.7，则误差超过10%。算法7.1和算法7.2结果的差别很小。不过，对非常小的约束因子，误差也有很小的增长，这个误差是横向离散化造成的。

在相向传播泵浦配置中（见图7.7b），方程（7.27）不考虑光纤端面的反射，需要引入如下边界条件求解：

$$P_p(z=L)=P_{pump}$$

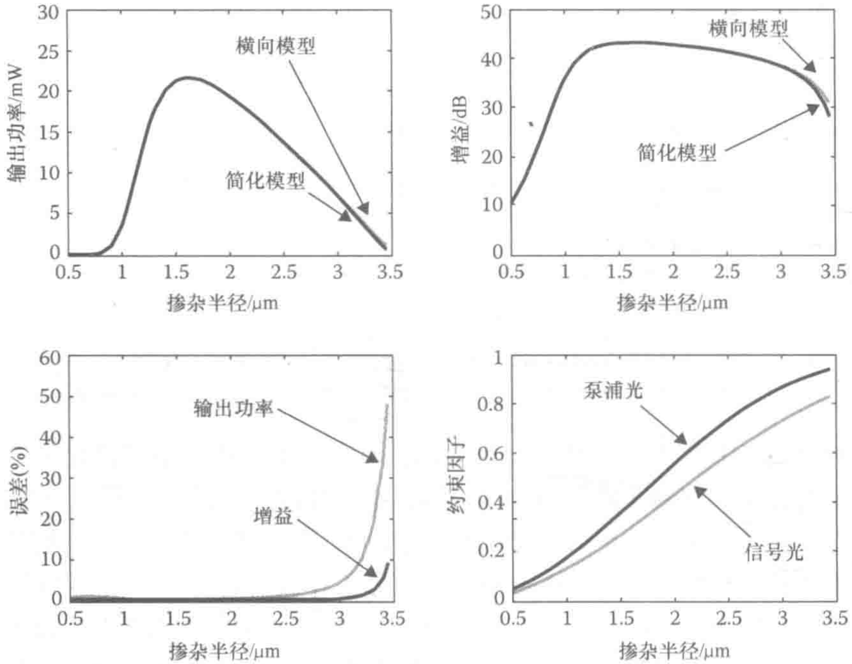


图 7.9 比较算法 7.1 和算法 7.2 计算放大器输出功率和增益

$$P_s(z=0)=P_{signal}$$

式中，P_{pump}为泵浦功率；P_{signal}为入射信号光功率。在 $z=0$ 处的泵浦功率值未知。这实际上是一个两点边界值问题，通常可以用打靶法求解。我们将在“光纤放大器建模”一节中详细讨论这种方法。

7.3.2 放大自发辐射

光纤中的光放大包含了放大自发辐射过程。放大自发辐射对光纤放大器的工作有较大的影响。

在这一节中，我们讨论放大自发辐射如何在光纤放大器建模中体现。我们用 Yb^{3+}掺杂硅玻璃光纤放大器作为实例研究。我们采用双能级镱离子模型：$^2F_{5/2}$和$^2F_{7/2}$，在 915nm 泵浦[11]。考虑一个信号波长 λ_k、波长间隔 $\Delta\lambda$ 的光梳，双能级结构的两个能级，可以用如下两个方程表示[11]：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ N \end{bmatrix} \tag{7.29}$$

用以计算离子能级粒子数。在方程（7.29）中，系数 a_{xx}为

$$a_{11} = \frac{\Gamma_p\lambda_p\sigma_a(\lambda_p)}{Ahc}[P_p^+ + P_p^-] + \frac{\Gamma_s}{Ahc}\sum_{k=1}^{K}\lambda_k\sigma_a(\lambda_k)[P^+(\lambda_k) + P^-(\lambda_k)]$$

$$a_{12} = -\frac{\Gamma_p\lambda_p\sigma_a(\lambda_p)}{Ahc}[P_p^+ + P_p^-] - \frac{\Gamma_s}{Ahc}\sum_{k=1}^{K}\lambda_k\sigma_e(\lambda_k)[P^+(\lambda_k) + P^-(\lambda_k)] - \frac{1}{\tau}$$

式中，τ 为$^2F_{5/2}$能级的寿命；$P_p^{\pm}$ 和 $P^{\pm}$（λ_k）分别为泵浦光和信号光的光功率，符号“+”和“-”表示了向前和向后的行波；A 为掺杂截面；h 为普朗克常数；c 为真空光速；$\Gamma_{s/p}$为信号/泵浦光的约束因子；$\sigma_{a/e}$为$^2F_{5/2}-{}^2F_{7/2}$跃迁的吸收/发射界面。同样注意，近似式（7.26）给出了功率和光子通量的关系。

方程（7.28）需要一组描述泵浦和信号功率的常微分方程：

$$\frac{dP_p^{\pm}}{dz} = \mp\Gamma_p[\sigma_a(\lambda_p)N_2 - \sigma_e(\lambda_p)N_1]P_p^{\pm} \mp a\, P_p^{\pm} \tag{7.30a}$$

$$\frac{dP_s^{\pm}}{dz} = \mp\Gamma_s[\sigma_a(\lambda_s)N_2 - \sigma_e(\lambda_s)N_1]P_s^{\pm} \mp a\, P_s^{\pm} \tag{7.30b}$$

以及如下方程式，其考虑了放大自发辐射过程产生的光的功率累积：

$$\frac{dP^{\pm}(\lambda)}{dz} = \mp\Gamma_s[\sigma_a(\lambda)N_2 - \sigma_e(\lambda)N_1]P^{\pm}(\lambda) \mp a\, P^{\pm}(\lambda) + 2\sigma_e(\lambda)N_2\frac{hc^2}{\lambda^3}\Delta\lambda \tag{7.30c}$$

对比方程（7.25），方程（7.30a、b）包含了光纤衰减项，而方程（7.30c）另外包含了自发发射（ASE）过程项[2]：

$$2\sigma_e(\lambda)N_2\frac{hc^2}{\lambda^3}\Delta\lambda$$

在方程（7.30）中，均包含了向前和向后传播波。因此，可以用于无法忽略光纤端面反射的情况。为了求解方程（7.29）和方程（7.30），我们需要入射泵浦和信号光的值。向前和向后传播 ASE 光的边界条件为

$$P^{+}(\lambda, z=0) = 0$$

$$P^{-}(\lambda, z=L) = 0$$

由此，我们又得到一个两点边界值问题，我们将在“光纤激光器建模”一节中详细讨论它的解法。包含自发辐射效应的光纤放大器建模实例，请参考 Pedersen 等人[12]，Sorbello 等人[13]，和 Gorjan[14] 中的例子。

最后，我们注意到，镧系掺杂平面波导放大器的单模传输假设并不一总成立，需要直接结合麦克斯韦方程和速率方程计算[15]。这需要纵向离散步长更小，所以会对模型的计算效率造成负面影响。

7.4 光纤激光器建模

对同向传播，铒离子掺杂光纤放大器的光子分布计算，需要两个常微分方程（7.27），并需要泵浦和信号泵浦功率的初始边界值。但是，当泵浦光和信号光相向时，就会出现两点边界值问题。在这种情况中，需要使用更高级的算法计算常微分方程的数值积分，例如打靶法[16]。泵浦光和信号光相向传播的情况，也会出现在光纤放大器中。因此，在本节，我们以一个 Yb^{3+} 掺杂光纤激光器作为实例进行研究，如图 7.10 所示。

在基态的 Yb^{3+} 有两个能级 $^2F_{5/2}$ 和 $^2F_{7/2}$，915nm 泵浦。其能级结构相对简单的表达式如下所示：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ N \end{bmatrix} \tag{7.31}$$

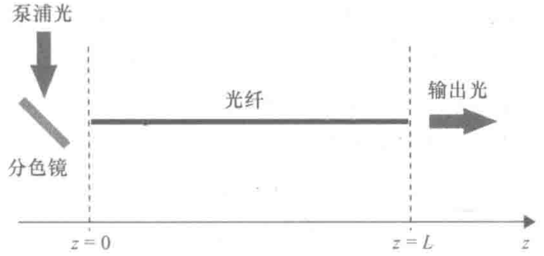


图 7.10 Yb^{3+} 掺杂光纤配置的示意图

在式（7.31）中，系数 a_{11} 和 a_{12} 为

$$a_{11} = \frac{\Gamma_p \lambda_p \sigma_a(\lambda_p)}{Ahc}[P_p^+ + P_p^-] + \frac{\Gamma_s \lambda_p \sigma_a(\lambda_s)}{Ahc}[P_s^+ + P_s^-]$$

$$a_{12} = \frac{\Gamma_p \lambda_p \sigma_e(\lambda_p)}{Ahc}[P_p^+ + P_p^-] - \frac{\Gamma_s \lambda_s \sigma_e(\lambda_s)}{Ahc}[P_s^+ + P_s^-] - \frac{1}{\tau}$$

式中，τ 为 $^2F_{5/2}$ 能级的寿命；$P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 分别为泵浦光和信号光的光功率，符号“+”和“−”表示了向前和向后的行波；A 为掺杂截面；h 为普朗克常数；c 为真空光速；$\lambda_{s/p}$ 为信号/泵浦光波长；$\Gamma_{s/p}$ 为信号/泵浦光的约束因子；$\sigma_{a/e}$ 为 $^2F_{5/2}-{}^2F_{7/2}$ 跃迁的吸收/发射界面，如图 7.11 所示。同样注意，近似式（7.26）给出了功率和光子通量的关系。

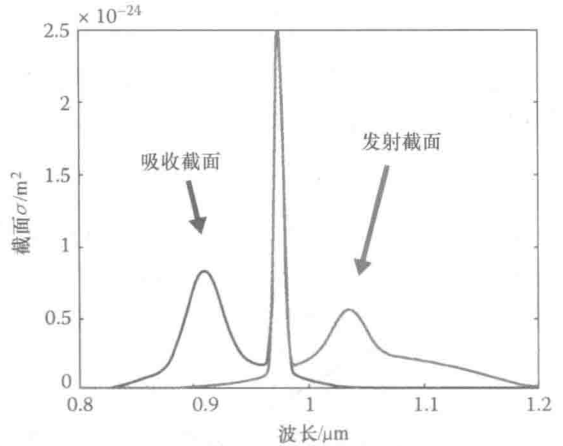


图 7.11 硅玻璃中 Yb^{3+} 发射和吸收截面

方程（7.31）需要一组描述泵浦和信号功率的常微分方程：

$$\frac{dP_p^{\pm}}{dz} = \mp \Gamma_p[\sigma_a(\lambda_p)N_2 - \sigma_e(\lambda_p)N_1]P_p^{\pm} \mp a\ P_p^{\pm} \tag{7.32a}$$

$$\frac{dP_s^{\pm}}{dz} = \mp \Gamma_s[\sigma_a(\lambda_s)N_2 - \sigma_e(\lambda_s)N_1]P_s^{\pm} \mp a\ P_s^{\pm} \tag{7.32b}$$

式中，a 为光纤衰减系数。因为泵浦光和信号光波长差异并不显著，所以泵浦和信号吸收系数在这里认为没有差别。为了求解方程（7.31）和方程（7.32），我们需要在光纤末端引入边界条件。对图 7.10 的结构，对泵浦光和信号光，有

$$\begin{aligned} &P_p^+(z=0) = P_{pin} \\ &P_p^-(z=L) = r_F P_p^+(z=L) \\ &P^+(\lambda, z=0) = r_{DM} P^-(\lambda, z=0) \\ &P^-(\lambda, z=L) = r_F P^+(\lambda, z=L) \end{aligned} \tag{7.33}$$

式中，P_{pin}为输入泵浦功率；r_F 为菲涅尔光纤端面反射率，对硅玻璃假设其等于0.035；r_{DM}为信号波长1.037时的分色镜反射率。

我们用打靶法结合定点法，求解方程（7.31）和（7.32），如算法7.3所示。

算法7.3 用打靶法和定点法对1D YB^{3+}掺杂光纤激光器建模

1. 开始；
2. 设置所有参数的值；
3. 计算纵向步长 Δz；
4. 设置 $z=0$ 处 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 的初始值；
5. 对方程（7.32）用常微分方程积分格式计算光纤左侧端面 $z=L$ 处的 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 值；
6. 由方程（7.36）计算 $z=L$ 反射后的 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 值；
7. 对方程（7.32）用常微分方程积分格式计算光纤右侧端面 $z=0$ 处的 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 值；
8. 由方程（7.33）计算 $z=0$ 处 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 新的值；
9. 如果在 $z=0$ 处的新 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 值和初始值差距大于预定义的余差，则设置 $z=0$ 处 $P_p^{\pm}$ 和 $P_s^{\pm}$ 的初值等于新值（定点法计算的值），并跳转到步骤5；
10. 停止。

算法7.3对图7.10的Yb^{3+}掺杂光纤激光器结构进行了仿真。仿真参数见表7.1。

表7.1 Yb^{3+}光纤激光器建模参数

量	值	单位
Yb^{3+}离子浓度	6×10^{25}	m^{-3}
稀土掺杂截面 A	3×10^{-10}	m^2
光纤长度	1	m
光纤损耗	0.01	1/m
能级$^2F_{5/2}$寿命 τ	0.84	ms
$z=L$ 处信号光反射率	0.035	
$z=L$ 泵浦光反射率	0.035	
$z=0$ 处信号光反射率	0.99	
$z=0$ 处信号光反射率	0	
信号光约束因子	0.7	
泵浦光约束因子	0.01	
泵浦波长	0.915	μm
信号波长	1.037	μm

因为我们使用双包层光纤，所以泵浦光约束因子较小[17]。仿真使用的发射和吸收截面谱见图7.11[18]。图7.12所示为Yb^{3+}掺杂光纤中，信号和泵浦的输出功率与 z 之间的关系，结果由打靶法迭代得出。打靶法进行到第二次迭代的结果就已经基本稳定，第三次和第四次迭代只做了微小的修正。

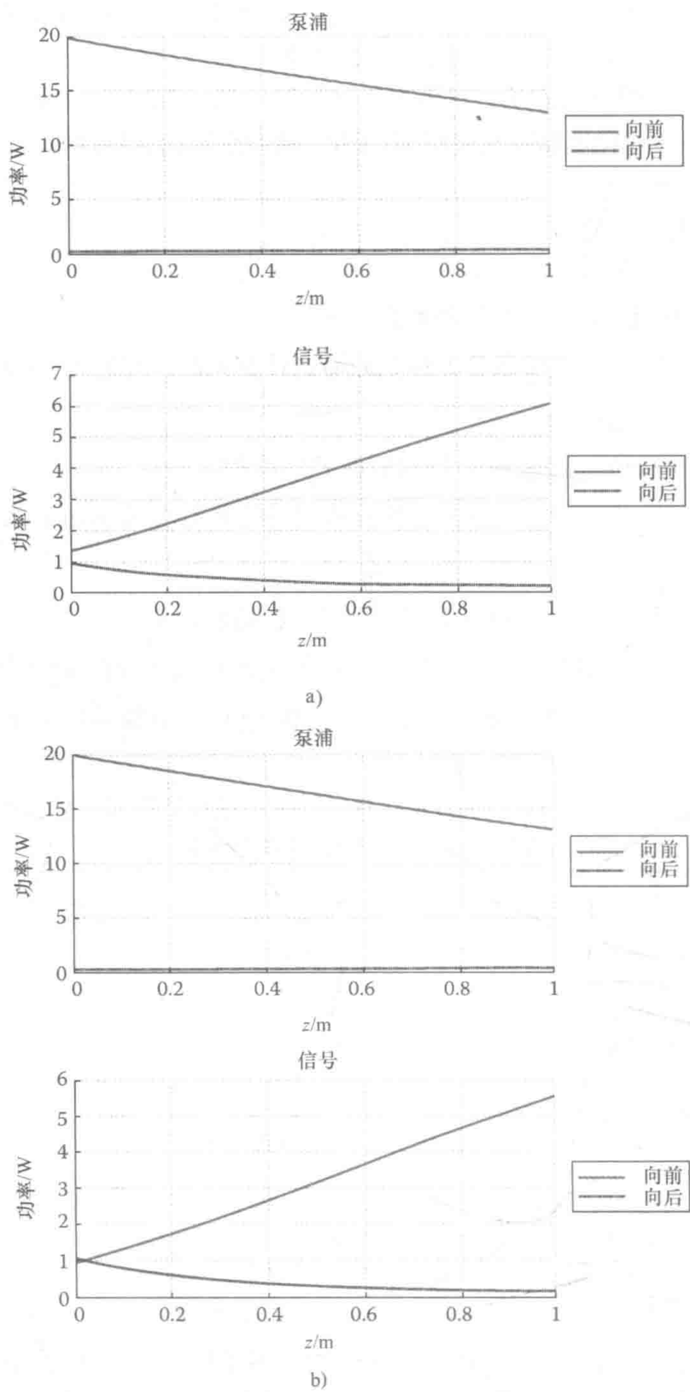
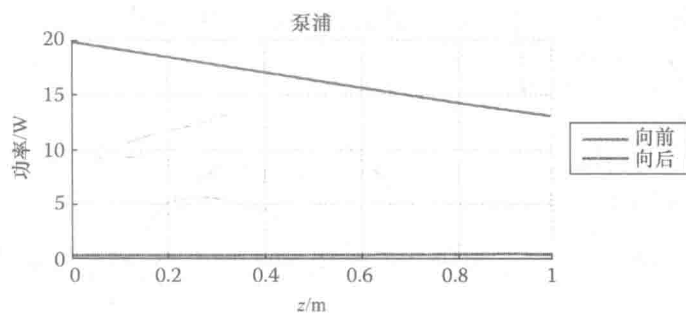
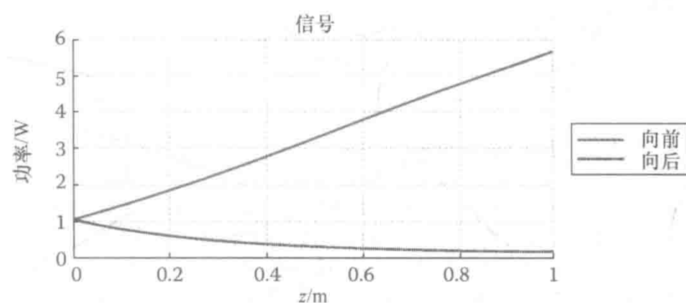


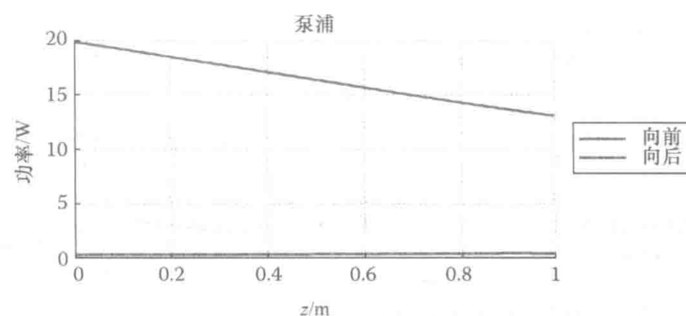
图 7.12　用算法 7.3 计算的光纤中信号和泵浦的输出功率与 z 之间的关系

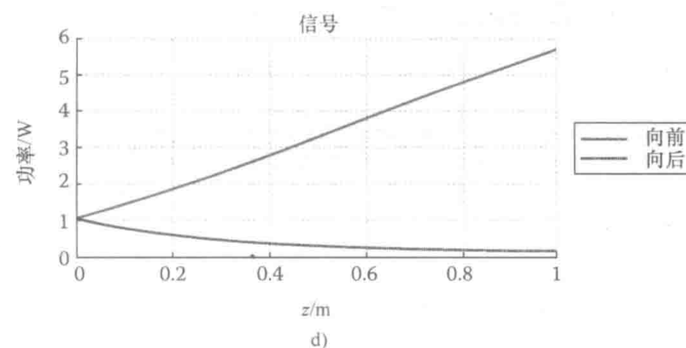
a）一次迭代　b）两次迭代





c)





d)

图 7.12　用算法 7.3 计算的光纤中信号和泵浦的输出功率与 z 之间的关系（续）

c）三次迭代　d）四次迭代

为了完整器件，我们下面给出了算法 7.3 的 MATLAB 代码：

```
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e
% initial constants
I = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;

% setting wavelength grid storing pump and signal wavelengths
global LAM_GRID
LAM_PUMP = 0.915e-6;%pump wavelength [m]
LAM_SS = 1.037e-6;%signal wavelength [m]
LAM_GRID = [LAM_PUMP;LAM_SS;LAM_PUMP;LAM_SS];
% pump and signal wavelengths in vertical
% vector for forw(1st) & back(2nd) waves

Fib_Len = 1.;% fibre laser length [m]
Pp_forw = 20.;
%pump power forward [W] (input at left side, i.e. z = 0)
ROC_p = 0.035;%reflectivity for pump at output
ROC_s = 0.035;%reflectivity for signal at output
RHR_p = 0.0;%reflectivity for pump at dichroic mirror
RHR_s = 0.99;%reflectivity for signal at dichroic mirror

%initial photon distribution
Y0 = 0.1*Pp_forw*ones(size(LAM_GRID));
%initial photon distribution for x = 0
Y0(1) = (1.-RHR_p)*Pp_forw;
%setting initial value of forward pump
Y0(3) = 0.0;%settinig initial value of backward pump (at z = 0)

%calculation of the field distribution in the laser
cavity%%%%%%%%%%%%%%%% %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%
'start'
options = odeset('RelTol',1e-3,'AbsTol',1.e-6*ones(size…
(LAM_GRID)));% accuracy params for ode
for j1 = 1:4

%forward integration
[t,y] = ode45(@one_step1,[0 Fib_Len],Y0,options);
%reflection at the right facet (z = Fib_len)
Y0 = y(size(y,1),:);
Y0(3) = ROC_p*Y0(1);
Y0(4) = ROC_s*Y0(2);
%backward integration
[t,y] = ode45(@one_step1,[Fib_Len 0],Y0,options);
%reflection at the left facet (z = 0)
Y0 = y(size(y,1),:);
Y0(1) = RHR_p*Y0(3)+(1.0-RHR_p)*Pp_forw;
Y0(2) = RHR_s*Y0(4);
```

```
end

function dydt = one_step1(t,y)
global LAM_GRID

pi = 3.141592653589793e+000;
h = 6.626e-34;%[Js]
v0 = 3e8;%[m/s]
Gamma_fibP = 0.01;%confinement factor for pump
Gamma_fibS = 0.7;%confinement factor for signal
A_dopRE = 3e-10;%rare earth doping cross section [m2]
tau_Yb = 840.e-6;% life time for Yb [s]
N_Yb = 6e25;%Yb dopant concentration [1/m3]
alfa_fib = 1.e-1;%fiber loss [1/m]

Gamma_fib = Gamma_fibS*ones(size(LAM_GRID));
Gamma_fib(1) = Gamma_fib(1)*Gamma_fibP/Gamma_fibS;
Gamma_fib(3) = Gamma_fib(3)*Gamma_fibP/Gamma_fibS;
%calculation of C coefficient = gamma*lam/(h*c*A_dopRE)
C_Yb = Gamma_fib.*LAM_GRID/(h*v0*A_dopRE);

%calculation of level populations: N2 and N1
N2_Yb = N_Yb*sum(C_Yb.*Yb_abs(LAM_GRID).*y)/…
(1/tau_Yb+sum(C_Yb.*(Yb_abs(LAM_GRID)+Yb_ems(LAM_GRID)).*y));
N1_Yb = N_Yb-N2_Yb;

%calculation of RHS' of coupled ODEs
dydt = Gamma_fib.*(Yb_abs(LAM_GRID)*N1_Yb-…
Yb_ems(LAM_GRID)*N2_Yb).*y;
dydt(1:2) = -dydt(1:2);
%introducing - sign for forward propagating waves
dydt(2) = dydt(2)-alfa_fib*y(2);
%adding fiber loss term to forw signal wave
dydt(4) = dydt(4)+alfa_fib*y(4);
%adding fiber loss term to back signal wave
```

在 one _ step1. m 中需要和主函数协同求解函数 dydt。我们没有提供函数 Yb _ abs. m 和 Yb _ ems. m，根据图 7. 11 可以容易地写出这两个函数。我们用标准 MATLAB Runge – Kutta 算法求解场微分方程的积分。

还有一些扩展资料研究了一维单波长稳态模型对多种镧系离子掺杂光纤激光器的建模问题，它们分别为铒离子掺杂激光器[19]，铒 – 镱离子共掺杂激光器[20]，铥离子和钬离子激光器[21]，以及最新的镝、铽以及镨激光器等工作在中红外波段的激光器[22]。

7.5　时域模型

光纤激光器和放大器的一类重要模型是时域模型。这类模型通常基于基模传输的假设。我们考虑 Yb^{3+} 掺杂放大器作为实例。这种放大器涉及两个能级（$^2F_{5/2}$

和$^2F_{7/2}$）和915nm泵浦。它的能级结构可以用一个简单的常微分方程表示：

$$\frac{dN_2}{dt}=a_{11}(N-N_2)+a_{12}N_2 \tag{7.34}$$

在方程（7.34）中，系数a_{11}与a_{12}的定义与方程（7.28）相同。方程（7.34）需要一个描述泵浦和信号功率演进的常微分方程求解：

$$\frac{\partial P_p^{\pm}}{\partial z}\pm\frac{1}{v}\frac{\partial P_p^{\pm}}{\partial t}=\mp\Gamma_p[\sigma_a(\lambda_p)N_2-\sigma_e(\lambda_p)N_1]P_p^{\pm}\mp a\,P_p^{\pm} \tag{7.35a}$$

$$\frac{\partial P(\lambda)^{\pm}}{\partial z}\pm\frac{1}{v}\frac{\partial P(\lambda)^{\pm}}{\partial t}=\mp\Gamma_s[\sigma_a(\lambda)N_2-\sigma_e(\lambda)N_1]P(\lambda)^{\pm}\mp a\,P(\lambda)^{\pm}+2\sigma_e(\lambda)N_2\frac{hc^2}{\lambda^3}\Delta\lambda \tag{7.35b}$$

同样，如“光纤放大器建模”和“光纤激光器建模”的实例所示，方程（7.34）和方程（7.35）需要引入提供器件配置信息的边界条件。

求解方程（7.34）和方程（7.35）的第一步是将偏微分方程（7.35）转换为一组常微分方程组。转换可以有两种方法。一种是沿着z轴方向进行离散化[23,24]，或者沿着时间轴进行离散化[25]。进行这一步后，可以得到一组一阶常微分方程组，它可以通过标准数值解法求解。众多文献有这方面的示例可供参考[17,23,25]。

当脉冲非常短时，需要更谨慎的处理模型中包含的色散效应。应用第9章中的方法结合标准时域光纤器件模型可以解决这个问题[26]。

7.6 模型参数的提取

镧系光器件数值仿真参数的精确估计对预测性模型至关重要。镧系离子掺杂光器件模型的关键参数是发射或吸收横截面和光致发光寿命。这两个参数的值通常从实验中间接测量得到。测量的对象既可以是实际的光子器件中镧系掺杂光纤的一部分，也可以是玻璃块样品。玻璃块样品可以从光纤半成品中截取或单独制作。原则上，直接从一段光纤测得的吸收横截面和光子寿命更有效，预测性更好。但是一般需要预先设计测量配置，且一般无法直接测得结果。用采用玻璃块样品，大部分光学实验室都可以使用标准测量设备，对其进行标准测量。我们首先对玻璃块样品的测量流程进行概述。

提取镧系掺杂玻璃块样品的发射和吸收光谱，以及光致发光寿命有两种标准测量。它们是光致发光测量和光学吸收测量。为了测量吸收横截面光谱，掺杂玻璃样品需要有两个平行平面。一般测量采用傅立叶变换红外光谱仪器（FTIR）。如果样品厚度已知，则吸收横截面的值可以从FTIR的吸收测量结果中直接计算得到。

光致发光谱线测量的一般实验配置包括泵浦激光器、斩波器、光致发光收集光学器件，一个可从单色仪提供散射泵浦辐射的长带通滤波器，单色仪、光探测器、一个锁相放大器，以及可控制所有器件，通过数据采集卡（Data Acquistion，DAQ）收集数据的计算机，如图7.13所示。

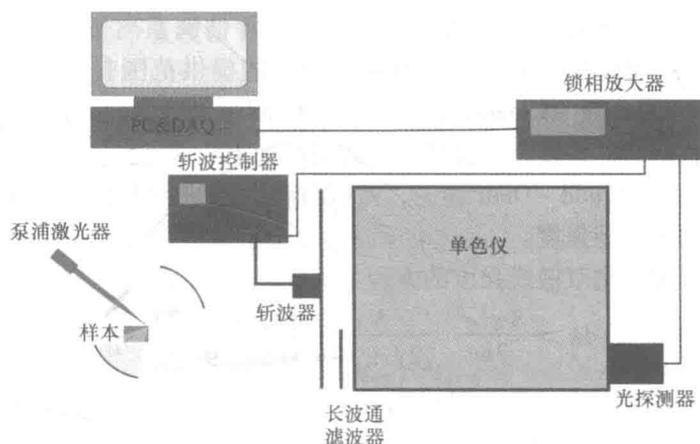


图7.13　光致发光测量的实验配置示意

准备的样品应该将再吸收效应降到尽可能小[27]。镧系掺杂浓度不应过高，以避免上转换效应。不过，也应该注意到，掺杂浓度过低会造成光致发光信号过弱。泵浦激光的工作波长应该与给定镧系离子的吸收带相一致。光信号在通过斩波器时，按可调频率进行斩波，频率调整需要考虑跃迁的光致发光寿命。光致发光寿命测量配置与光谱测量基本一致。不过，从光探测器输出的信号，需要通过跨阻放大器而不是锁相放大器连接到示波器，从而可以得到呈指数衰减的波形，提取出致发光寿命的。最后，我们注意到，不使用 FTIR，也可以通过改进光致发光测量配置得到吸收横截面。该改进配置中，需要使用白光源而不是泵浦激光器，如图7.14所示。

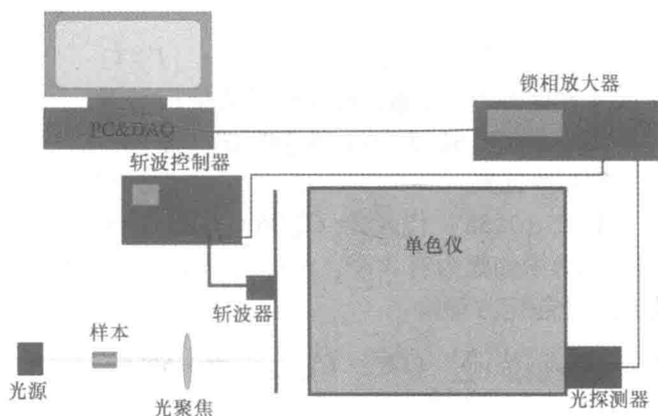


图7.14　吸收测量的实验配置

测得吸收光谱、光致发光光谱和光致发光寿命后，就可以通过各种方法得到辐射跃迁所对应的发射和吸收横截面和光致发光寿命。如前文所述，如果配置良好的玻璃块样品厚度已知，则可以直接从 FTIR 吸收测量结果中算出吸收横截面。而光致发光谱线测量只能得到光致发光横截面谱线的形状。它需要量化为发射横截面的绝对值，这需要应用 Fuchbauer – Ladenburg 理论或 McCumber 理论[2]。此外，由

Judd - Ofelt 理论，吸收测量的结果还可以用来评估镧系离子辐射跃迁的效率[2]。不仅如此，大多数情况，实验室的有限设备只能提供范围有限的测量。这种情况下，可以用 Fuchbauer - Ladenburg 理论、McCumber 理论和 Judd - Ofelt 理论补充所需的信息。我们将这些理论中有用的公式列举如下。

我们首先应用 Judd - Ofelt 理论，对吸收截面谱进行测量。该方法可以从吸收截面谱中抽取出跃迁强度。

吸收截面和电磁双极线强度的方程如下：

$$\int_{\text{band}} k(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda = \frac{8\pi^3 q^2}{3hc}\,\frac{N\lambda}{(2J+1)n_r^2}\left[\frac{n_r(n_r^2+2)^2}{9}S_{JJ'}^{ed} + n^3 S_{JJ'}^{md}\right] \tag{7.36a}$$

以单位 cgs 表示，而以 SI 单位表示为

$$\int_{\text{band}} k(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda = \frac{8\pi^3 q^2}{3hc}\,\frac{N\lambda}{(2J+1)n_r^2}\left[\frac{n_r(n_r^2+2)^2}{9}S_{JJ'}^{ed} + n^3 S_{JJ'}^{md}\right]\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \tag{7.36b}$$

式中，k 为吸收系数，单位 cm^{-1}；q 为单位电荷，单位库伦；h 为普朗克常数，c 为自由空间光速；n_r 为体玻璃的折射率；J 为终态的总角动量；N 为镧系离子浓度；$S_{JJ'}^{ed}$ 和 $S_{JJ'}^{md}$ 分别表示两个能级间的电和磁双极子强度，这两个能级的总角动量分别为 J 和 J'。按照 Judd - Ofelt 理论，电和磁双极子强度可以如下表示：

$$S_{JJ'}^{ed} = \sum_{t=2,4,6} \Omega_t \left|\langle 4f^n[S,L]J \| U^t \| 4f^{n'}[S'L']J'\rangle\right|^2 \tag{7.37}$$

$$S_{JJ'}^{md} = \left(\frac{h}{4\pi mc}\right)\langle f^n[SL]J \| L+2S \| f^n[S'L']J'\rangle^2 \tag{7.38}$$

式中，Ω_t 为 Judd - Ofelt 参数；

$$\left|\langle 4f^n[S,L]J \| U^t \| 4f^{n'}[S'L']J'\rangle\right|$$

为两能态 J 和 J' 间元素化简矩阵元素；m 为电子质量；

$$\langle f^n[SL]J \| L+2S \| f^n[S'L']J'\rangle$$

为算子 $L+2S$ 的化简矩阵元素。

将式（7.37）和式（7.38）代入式（7.36），可以得到一个 Judd - Ofelt 参数 Ω_t 的 n 元方程组。因为未知数为有 3 个，所以这个如果考虑吸收带超过 3 个，则这个方程组会变成一个超定方程组：

$$\begin{aligned} F_n &= C_{JJ'}\left[\chi_{JJ'}^{ed}\sum_{t=2,4,6}(\Omega_t^{JJ'}\cdot U_{JJ'}^t) + \chi_{JJ'}^{md}\cdot S_{JJ'}^{md}\right]\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \\ &= C_{JJ'}\left[\chi_{JJ'}^{ed}\cdot(\Omega_2\cdot U_{JJ'}^2 + \Omega_4\cdot U_{JJ'}^4 + \Omega_6\cdot U_{JJ'}^6) + \chi_{JJ'}^{md}\cdot S_{JJ'}^{md}\right]\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \\ &= (\Omega_2\cdot M_{n1} + \Omega_4\cdot M_{n2} + \Omega_6\cdot M_{n3}) + S_n^{md} \\ &= M\cdot\Omega + S_n^{md} \end{aligned} \tag{7.39}$$

式中，

$$F_n = \int_{\text{band}} k(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$$

计算了光吸收系数和每个吸收带 n 的波长的面积分，吸收带 n 对应了从初始态 J 到终态 J'的跃迁。为了清晰的理解，我们用序号 n 表示表示 FTIP 吸收谱所有的吸收带数量。系数 $C_{JJ'}$ 定义为

$$C_{JJ'} = \frac{8\pi^3 q^2 N\lambda_{pk}}{3hc(2J+1)} \frac{1}{n_r^2}$$

由此，方程（7.39）可以写为更紧凑的形式：

$$F = M\Omega - S^{md}$$

其中矩阵 M 定义为

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ M_{n1} & M_{n2} & M_{n3} \end{bmatrix}$$

$$M_{n1} = C_{JJ'}\chi_{JJ'}^{ed}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot U_{JJ'}^2$$

$$M_{n2} = C_{JJ'}\chi_{JJ'}^{ed}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot U_{JJ'}^4$$

$$M_{n3} = C_{JJ'}\chi_{JJ'}^{ed}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot U_{JJ'}^6$$

三元素向量 Ω 为

$$\Omega = \begin{bmatrix} \Omega_2 \\ \Omega_4 \\ \Omega_6 \end{bmatrix}$$

n 元素向量 S^{ed}、S^{md}和 F 为

$$S^{ed} = \begin{bmatrix} S_1^{ed} \\ S_2^{ed} \\ \vdots \\ \vdots \\ S_n^{ed} \end{bmatrix}$$

$$S^{md} = \begin{bmatrix} S_1^{md} \\ S_2^{md} \\ \vdots \\ \vdots \\ S_n^{md} \end{bmatrix}$$

$$F=\begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ F_n \end{bmatrix}$$

其中，

$$S_n^{\mathrm{md}}=C_{\mathrm{JJ'}}\chi_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{md}}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{md}}$$

n 为跃迁数，通常等于 FTIR 吸收谱中所显示的吸收带数。

由式（7.39），Ω_t 的最小均方值可以表示为[28]

$$\Omega=(M^{\mathrm{T}}M)^{-1}M^{\mathrm{T}}(F-S^{\mathrm{md}}) \tag{7.40}$$

其中因子 F 包含了方程（7.36）左侧积分得到的面积值。

确认 Judd – Ofelt 参数 Ω_t 以后，就可以得到从能级 J 到能级 J′的自发辐射跃迁率：

$$A_{\mathrm{JJ'}}=\frac{64\pi^4q^2}{3h(2J+1)\lambda^3}\left(\frac{n_r(n_r^2+2)^2}{9}S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{ed}}+n^3S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{md}}\right) \tag{7.41a}$$

用 cgs 单位表示，用 SI 单位表示为

$$A_{\mathrm{JJ'}}=\frac{64\pi^4q^2}{3h(2J+1)\lambda^3}\left(\frac{n_r(n_r^2+2)^2}{9}S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{ed}}+n^3S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{md}}\right)\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \tag{7.41b}$$

式中，J 为高能态的量子数。能态 J 到所有能态 J' 的总辐射寿命，定义为自发辐射跃迁率到能态 J' 的和的导数：

$$\tau_{\mathrm{J}}=\frac{1}{\sum_J A_{\mathrm{JJ'}}} \tag{7.42}$$

分支比给出了活跃状态坠落到量子数为 J′的能态的概率：

$$\beta_{\mathrm{JJ'}}=\tau_{\mathrm{J}}A_{\mathrm{JJ'}} \tag{7.43}$$

一般由：

$$S_{\mathrm{JJ'}}^{\mathrm{ed}}=\Omega_2\cdot U^{(2)}+\Omega_4\cdot U^{(4)}+\Omega_6\cdot U^{(6)}$$

算出电双极线强度。

式（7.42）和式（7.43）预测的光子衰减时间，于实验测量得到的值之间存在差别，是因为在玻璃基质中，辐射跃迁和非辐射跃迁同时发生。光子和基质声子之间的相互作用造成非辐射跃迁。非辐射跃迁率可由以下公式[2]估计：

$$A_{\mathrm{nr}}=B\exp(-a\Delta E)\left[1-\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^{-N_{\mathrm{ph}}} \tag{7.44}$$

式中，B 和 a 为基质相关常数；ΔE 为两个跃迁能级之间的带隙（单位为 cm^{-1}）；$\hbar\omega$ 为声子能量；k_{B} 为波尔兹曼常数；T 为温度；N_{ph} 为声子跨越带隙所需的最小能量。

由吸收截面谱，通过 McCumber 理论[2,29]，可以得到发射截面谱：

$$s_{\mathrm{e}}(v)=\sigma_{\mathrm{a}}(v)\exp\left(-\frac{hv}{kT}\right) \tag{7.45}$$

已知发射谱之后（通过光致发光测量或式（7.45）），可以得到绝对值[30]：

$$\sigma_{\mathrm{e}}(v)=s_{\mathrm{e}}(v)\exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) \tag{7.46}$$

式中，ε 可以由 Miniscalo 和 Quimby 的流程抽取[30]。McCumber 理论还可以得到辐射寿命和发射截面之间的关系[2]：

$$\frac{1}{\tau}=\frac{8\pi n_{\mathrm{r}}^{2}}{c^{2}}\int\nu^{2}\sigma_{\mathrm{e}}(\nu)\mathrm{d}\nu \tag{7.47}$$

Fuchbauer – Ladenburg 理论中有另外一个公式[2]：

$$\frac{1}{\tau}=\frac{8\pi n_{\mathrm{r}}^{2}}{\lambda^{2}}\int\sigma_{\mathrm{e}}(\nu)\mathrm{d}\nu=\frac{g_{1}}{g_{2}}\frac{8\pi n_{\mathrm{r}}^{2}}{\lambda^{2}}\int\sigma_{\mathrm{a}}(\nu)\mathrm{d}\nu \tag{7.48}$$

式中，λ 为空间波长，而 g_1 和 g_2 分别为子能带中的高能级和低能级。
需要注意的是，Fuchbauer – Ladenburg 理论和 McCumber 理论继续一系列假设，因此存在显著的误差。两种理论的局限性可以参考[2,27,31 – 34]。McCumber 分析也可以帮助评估增益谱与温度的相关性[35]。

举例说明，我们考虑一个掺杂 Tb^{3+} 的硫玻璃样品。样品用于 FTIR 吸收测量，如图 7.15 所示。FTIR 的原始测量结果如图 7.16 所示，而从该结果得到的基线抽取结果如图 7.17 所示。结果包括基态 $^{7}F_{6}$ 和 $^{7}F_{k}$ 之间的吸收谱，其中 $k=5$，4，3，2，1，0。由式（7.40），我们计算 Judd – Ofelt 参数。计算得到：$\Omega_2=7.9760\times10^{-20}\mathrm{cm}^2$，$\Omega_4=6.0978\times10^{-20}\mathrm{cm}^2$，$\Omega_6=2.3531\times10^{-20}\mathrm{cm}^2$。计算中使用了 Carnall 等人文献［36］中的化简矩阵元素，见表 7.2。式（7.36）左侧所需的积分值见表 7.3。

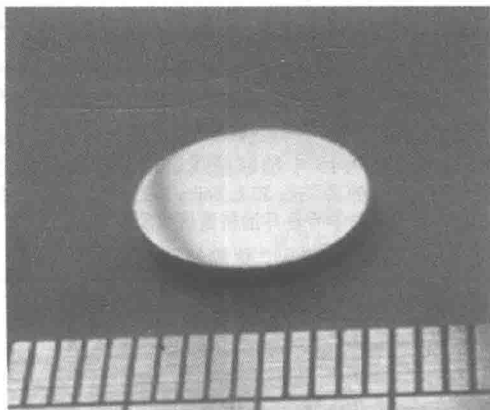


图 7.15　1000ppm 掺杂 Tb^{3+} 的硫玻璃样品，用于 FTIR 吸收测量
（样品由 Mid – IR 光子学学会的 Z. Tang 和 Ł. Sójka 准备，英国诺丁汉大学电磁学专业乔治格雷研究所）

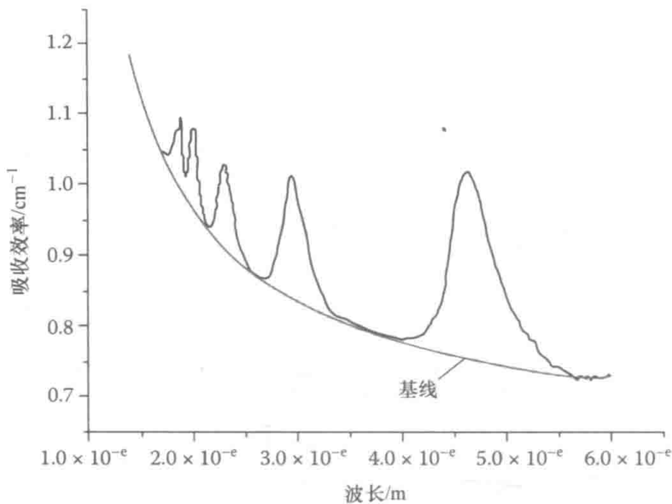


图 7.16　图 7.15 样品测量的 FTIR 吸收谱
（由 Mid - IR 光子学学会的 Z. Tang 和 Ł. Sójka 进行测量，英国诺丁汉大学电磁学专业乔治格雷研究所）

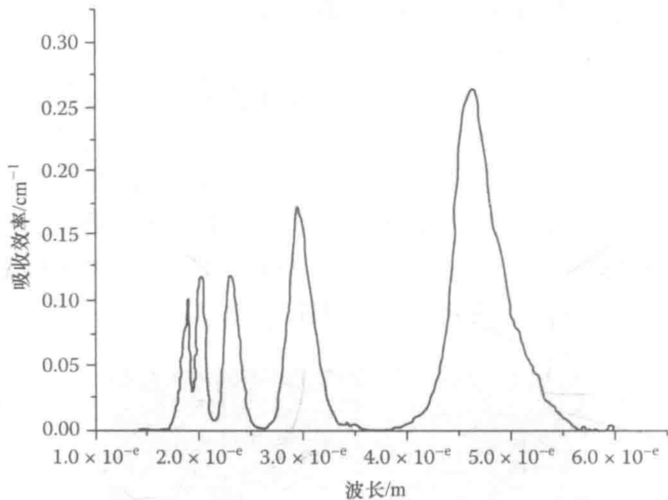


图 7.17　从图 7.13 中抽取基线后得到吸收截面谱
（由 Mid - IR 光子学学会的 Z. Tang 和 Ł. Sójka 进行测量，英国诺丁汉大学电磁学专业乔治格雷研究所）

表 7.2　Tb^{3+} 化简矩阵元素

跃迁	$[U2]^2$	$[U4]^2$	$[U6]^2$
$^7F_0 - ^7{}_F{}^6$	0.0	0.0	0.1441
$^7F_1 - ^7F_6$	0.0	0.0	0.3761
$^7F_2 - ^7F_6$	0.0	0.0481	0.4695
$^7F_3 - ^7F_6$	0.0	0.2323	0.4129
$^7F_4 - ^7F_6$	0.0888	0.5159	0.2658
$^7F_5 - ^7F_6$	0.5377	0.6420	0.1178

表 7.3　图 7.17 的吸收曲线面积（nm/cm）

n	跃迁	面积/(nm/cm)	λ_{pk}/nm
1	$^7F_0-^7F_6$	5.23017	1857
2	$^7F_1-^7F_6$	4.37141	1891
3	$^7F_2-^7F_6$	11.6962	2025
4	$^7F_3-^7F_6$	20.0819	2309
5	$^7F_4-^7F_6$	48.995	2951
6	$^7F_5-^7F_6$	148.262	4633

当 Ω_2、Ω_4 和 Ω_6 已知时，可以由式（7.42）和式（7.43）得到辐射寿命和分支比。由 McCumber 理论式（7.45）可以得到跃迁所对应的发射横截面，由 Miniscalo 和 Quimby 和 Dignonnet[31] 的流程可以计算得到式（7.46）中的参数 ε。还可以通过式（7.47）和式（7.48）对式（7.46）得到的频谱进行缩放。

光纤测量的标准设置如图 7.18 所示。系统包含泵浦激光器、光谱光源、斩波器、分路合路器、光致发光收集光学器件、单色仪，泵浦和信号功率探测电路[33]。该系统设置可直接测量增益和损耗与镧系离子掺杂光纤的泵浦之间的关系，它还可以测量光纤一侧的荧光光谱于泵浦光功率之间的关系[33]。然后，就可以从测量的增益和损耗谱推导出发射和吸收截面谱。更多这个系统的测量方法相关的内容，请参考 Desurvire 的著作[3]。

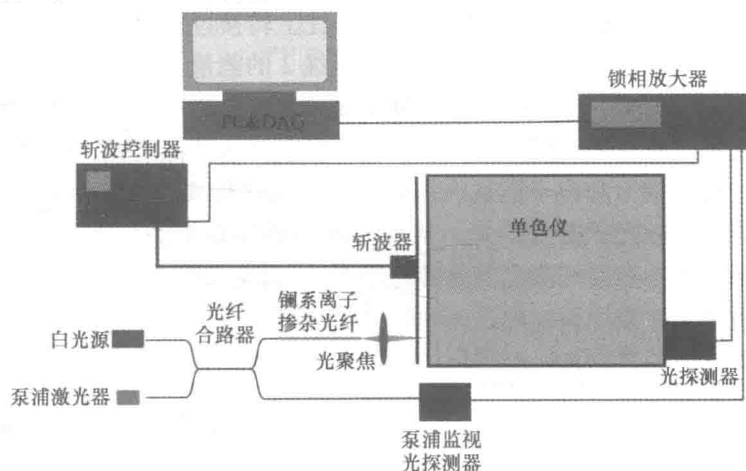


图 7.18　镧系离子掺杂光纤的光学性能测量配置示意图

7.6.1　镧系离子的相互作用效应

镧系离子较小的间距增大了离子间相互作用的概率。这种相互作用一般发生在高掺杂浓度的情况中。而在宿主材料中镧系离子的不均匀分布也会造成这种效

应[37]。镧系离子的相互作用会对光致发光光谱和光致发光寿命测量造成严重影响，所以也会影响用镧系掺杂光纤组成的器件的工作。镧系离子掺杂玻璃发生相互作用效应有三个例子：能量转移、交叉豫驰和合作上转换。

图 7.19 所示为能量转移过程的示意图。两个镧系离子参与了能量转移，“离子 1”最初在较高能级，而“离子 2”在较低能级。在能量转移过程中，能量从高能级离子转移到低能级离子。所以，最后“离子 1”在高能级，而“离子 2”在低能级。能量转移过程对光放大器有负面影响，因为它可以使泵浦光子的能量传递给不活跃的非辐射跃迁离子，或传递给不与入射光发生相互作用的离子。能量转移还有争先效应存在。例如对 Er^{3+} 和 Yb^{3+} 同时掺杂光纤的泵浦过程，泵浦光子主要由 Yb^{3+} 离子吸收，它的吸收横截面较大。然后由于能量转移过程，能量传递给了 Yb^{3+} 离子。在文献中，有更多共掺杂提高光学器件性能的例子[38,39]。

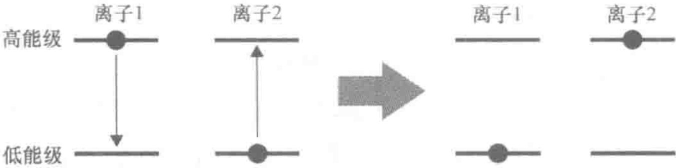


图 7.19 能量转移过程的示意图

图 7.20 所示为合作上转换过程的示意图。在合作上转换过程中，“离子 1”最初在能级 1 上，而“离子 2”在能级 2 上。由于相互作用，“离子 1”掉落到最低能级，而“离子 2”则跃迁到最高能级。为了让上转换过程更有效率，能级 1 和能级 0 之间的能量差，需要尽量等于能级 3 和能级 2 的能量差。其相反的过程在文献中称为交叉豫驰。通常，上转换过程一般对光子器件工作有负面影响。例如，出现上转换现象之后，跃迁到高能级的离子，会非辐射掉落到低能级，所以会造成泵浦光子的浪费。Er^{3+} 掺杂高声子能量的基质中常出现这种现象[40]。不仅如此，上转换过程还会导致有效光子寿命下降，从而，减小器件效率[2]。不过，上转换过程对短波长镧系离子掺杂光纤激光器非常有用[41]，而交叉豫驰过程会使 Er^{3+} 光纤激光器的量子效率呈指数增长，超过 100%[42]。

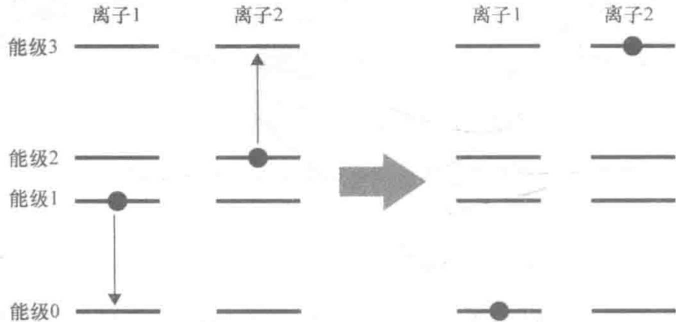


图 7.20 上转换过程的示意图

图 7.21 表现了两种镧系掺杂离子与玻璃基质间相互作用的例子。图 7.21a 所示

为硅玻璃基址中四能级 Er^{3+} 掺杂离子的上转换过程。非辐射跃迁离子跃迁到 $^4I_{13/2}$ 能级之后，发生了上转换。如果我们考虑，两个泵浦光子已经将两个离子带到了能级 $^4I_{13/2}$，则最后状态中实际损失了一个光子的能量。所以，这种相互作用会对铒掺杂光纤放大器的工作造成负面影响。图 7.21b 所示为铥玻璃基质中四能级 Tm^{3+} 的交叉豫驰。两个离子从 $^3F_4$ 能级发生交叉豫驰。如果我们考虑一个 808nm 光子已经将第一个离子带到了最高能级，则实际上交叉豫驰完成了一个泵浦光子将两个离子带到了 $^3F_4$ 能级的过程。所以，这个交叉豫驰可以实现 2μm 铥激光器的高效工作。

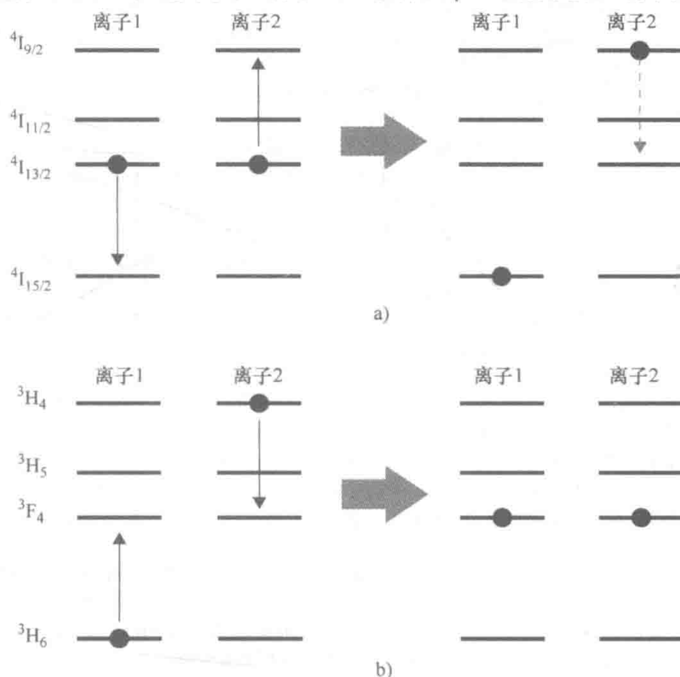


图 7.21　a）上转换过程和 b）交叉豫驰过程的示意图

固体中离子 - 离子相互作用的理论，最初奠基人为 Dexter[43]，然后又经过了 Kushida[44] 的改进。有关镧系离子间能量传递的严密研究，需要改变掺杂浓度，并通过光致发光寿命的实验测量和理论预测相比较[45]，确定离子相互作用的决定机制。也有更一般的，从简单的现象进行研究的方法[46,47]。这些简单的方法研究了光致发光衰减时间，推导光致发光的比例常数，引入到速率方程中，对两个离子间能量传递效应进行仿真。

参考文献

1. Digonnet, M.J.F., *Rare-Earth-Doped Fiber Lasers and Amplifiers*. 2001, New York: Marcel Dekker. Inc.
2. Becker, P.C., N.A. Olsson, and J.R. Simpson, *Erbium Doped Fiber Amplifiers. Fundamentals and Technology*. 1999, London: Academic Press.
3. Desurvire, E., *Erbium-Doped Fibre Amplifiers, Principles and Applications*. 1993, New York: John Wiley & Sons.

4. Saleh, B.E.A. and M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics*. 1991, New York: John Wiley & Sons Inc.
5. Ebeling, K.J., *Integrated Optoelectronics*. 1992, Berlin: Springer-Verlag.
6. Sobelman, I.I., *Atomic Spectra and Radiative Transitions*. 1996, London: Springer.
7. Judd, B.R., *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy*. 1963, New York: McGraw-Hill.
8. Desurvire, E., *Erbium-Doped Fibre Amplifiers, Principles and Applications*. 2002, New York: John Wiley & Sons.
9. Janos, M. and S.C. Guy, Signal-induced refractive index changes in erbium-doped fiber amplifiers. *Journal of Lightwave Technology*, 1998. 16(4): p. 542–548.
10. Giles, C.R. and E. Desurvire, Modeling erbium-doped fiber amplifiers. *Journal of Lightwave Technology*, 1991. 9(2): p. 271–283.
11. Wang, Y., C.Q. Xu, and H. Po, Analysis of Raman and thermal effects in kilowatt fiber lasers. *Optics Communications*, 2004. 242(4–6): p. 487–502.
12. Pedersen, B., et al., The design of erbium-doped fiber amplifiers. *Journal of Lightwave Technology*, 1991. 9(9): p. 1105–1112.
13. Sorbello, G., S. Taccheo, and P. Laporta, Numerical modelling and experimental investigation of double-cladding erbium-ytterbium-doped fibre amplifiers. *Optical and Quantum Electronics*, 2001. 33(6): p. 599–619.
14. Gorjan, M., T. North, and M. Rochette, Model of the amplified spontaneous emission generation in thulium-doped silica fibers. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2012. 29(10): p. 2886–2890.
15. Biallo, D., et al., Time domain analysis of optical amplification in Er3+ doped SiO2-TiO2 planar waveguide. *Optics Express*, 2005. 13(12): p. 4683–4692.
16. Press, W.H., S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. 2002, Cambridge: Cambridge University Press.
17. Wang, Y. and H. Po, Dynamic characteristics of double-clad fiber amplifiers for high-power pulse amplification. *Journal of Lightwave Technology*, 2003. 21(10): p. 2262–2270.
18. Pask, H.M., et al. Ytterbium-doped silica fiber lasers - versatile sources for the 1–1.2 micrometre region. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1995. 1(1): p. 2–13.
19. Jackson, S.D., M. Pollnau, and J. Li, Diode pumped erbium cascade fiber lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2011. 47(4): p. 471–478.
20. Yelen, K., L.M.B. Hickey, and M.N. Zervas, Experimentally verified modeling of erbium-ytterbium co-doped DFB fiber lasers. *Journal of Lightwave Technology*, 2005. 23(3): p. 1380–1392.
21. Evans, C.A., et al., Numerical rate equation modeling of a similar to 2.1-mu m - Tm3+/Ho3+ Co-doped tellurite fiber laser. *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(19): p. 4280–4288.
22. Sojka, L., et al., Study of mid-infrared laser action in chalcogenide rare earth doped glass with Dy3+, Pr3+ and Tb3+. *Optical Materials Express*, 2012. 2(11): p. 1632–1640.
23. Canat, G., et al., Dynamics of high-power erbium-ytterbium fiber amplifiers. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2005. 22(11): p. 2308–2318.
24. Eichhorn, M., Numerical modeling of Tm-doped double-clad fluoride fiber amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2005. 41(12): p. 1574–1581.
25. Zhang, Z., et al., Numerical analysis of stimulated inelastic scatterings in ytterbium-doped double-clad fiber amplifier with multi-ns-duration and multi-hundred-kW peak-power output. *Optics Communications*, 2009. 282(6): p. 1186–1190.
26. Huang, Z., et al., Combined numerical model of laser rate equation and Ginzburg-Landau equation for ytterbium-doped fiber amplifier. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2012. 29(6): p. 1418–1423.
27. Martin, R.M. and R.S. Quimby, Experimental evidence of the validity of the McCumber theory relating emission and absorption for rare-earth glasses. *Journal of the Optical Society of America B*, 2006. 23(9): p. 1770–1775.

28. Evans, C.A., et al., Numerical rate equation modeling of a ~ 2.1 - mm - Tm^{3+}/Ho^{3+} co-doped tellurite fiber laser. *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(19): p. 4280–4288.
29. McCumber, D.E., Einstein relations connecting broadband emission and absorption spectra. *Physical Review*, 1964. 136(4A): p. 954–957.
30. Miniscalo, W.J. and R.S. Quimby, General procedure for the analysis of Er^{3+} cross sections. *Optics Letters*, 1991. 16(4): p. 258–260.
31. Digonnet, M.J.F., E. Murphy-Chutorian, and D.G. Falquier, Fundamental limitations of the McCumber relation applied to Er-doped silica and other amorphous-host lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2002. 38(12): p. 1629–1637.
32. Quimby, R.S., Range of validity of McCumber theory in relating absorption and emission cross sections. *Journal of Applied Physics*, 2002. 92(1): p. 180–187.
33. Barnes, W.L., et al., Absorption and emission cross sections of Er^{3+} doped silica fibres. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(4): p. 1004–1010.
34. Foster, S. and A. Tikhomirov, In Defence of the McCumber relation for erbium-doped silica and other laser glasses. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2009. 45(10): p. 1232–1239.
35. Bolshtyansky, M., P. Wysocki, and N. Conti, Model of temperature dependence for gain shape of erbium-doped fiber amplifier. *Journal of Lightwave Technology*, 2000. 18(11): p. 1533–1540.
36. Carnall, W.T., H. Crosswhite, and H.M. Crosswhithe, Energy level structure and transition probabilities in the spectra of the trivalent lanthanides in LaF_3. *Argonne National Laboratory report/CNRS Colloq.*, 1977. 255(65).
37. Kik, P.G. and A. Polman, Cooperative upconversion as the gain-limiting factor in Er doped miniature Al_2O_3 optical waveguide amplifiers. *Journal of Applied Physics*, 2003. 91(9): p. 5008–5012.
38. Choi, Y.G., et al., Comparative study of energy transfer from Er^{3+} to Ce^{3+} in tellurite and sulfide glasses under 980 nm excitation. *Journal of Applied Physics*, 2000. 88(7): p. 3832–3839.
39. Tsang, Y., et al., Tm^{3+}/Ho^{3+} codoped tellurite fiber laser. *Optics Letters*, 2008. 33(11): p. 1282–1284.
40. van den Hoven, G.N., et al., Upconversion in Er-implanted Al_2O_3 waveguides. *Journal of Applied Physics*, 1996. 79(3): p. 1258–1266.
41. Paschotta, R., et al., 230 mW of blue light from a thulium-doped upconversion fiber laser. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1997. 3(4): p. 1100–1102.
42. Wu, J., et al., Efficient thulium-doped 2 mm germanate fiber laser. *IEEE Photonics Technology Letters*, 1996. 18(2): p. 334–336.
43. Dexter, D.L., A theory of sensitized luminescence in solids. *Journal of Chemical Physics*, 1953. 21(5): p. 836–850.
44. Kushida, T., Energy transfer and cooperative optical transitions in rare-earth doped inorganic materials. I. Transition probability calculation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1973. 34(5): p. 1318–1326.
45. de Sousa, D.F. and L.A.O. Nunes, Microscopic and macroscopic parameters of energy transfer between Tm^{3+} ions in fluoroindogallate glasses. *Physical Review B*, 2002. 66(024207): p. 1–7.
46. van den Hoven, G.N., et al., Upconversion in Er-implanted Al_2O_3 waveguides. *Journal of Applied Physics*, 1996. 79(3): p. 1258–1266.
47. Park, S.H., et al., Energy transfer between Er3+ and Pr3+ in chalcogenide glasses for dual-wavelength fiber-optic amplifiers. *Journal of Applied Physics*, 2002. 91(11): p. 9072–9077.

第8章　激光器二极管建模

激光器二极管因其紧密的结构，高可靠性和简单的泵浦机制，广泛应用于光通信、医学、打印和作为固体和光纤激光器的泵浦光源。在本章中，我们将讨论激光器二极管（LD）的建模和设计。首先简要介绍各种LD模型的分类，以帮助理解特定模型解决特定问题的优势。随后介绍零维（0D）模型、一维（1D）和多维（LD）模型，讨论将结合实例进行。读者应该对LD理论及其半导体光电子器件物理由足够的了解[1-12]。本章还会总领第3~7章的内容。因此，为了更好地理解本章内容，我们推荐在本章前能够理解第3~7章。本章的内容还会帮助理解有关LD建模教科书中更深的知识[13-15]。

8.1　引言

文献中可以看到众多激光器二极管（LD）模型，它们也包含在众多软件公司开发的商用设计软件中。这些模型需要的计算资源、复杂度和精度各异。这是由于LD模型和设计流程中遇到的问题差异很大所至。所以，选择合适的模型与许多制造参数，如激光器的类型，是垂直阱面发射二极管（VCSEL）还是边发射二极管（EELD）等。不仅如此，一个LD可以既以独立器件形式也可以以外反馈形式工作，谐振腔的类型也是非常重要的因素，如，是Fabry - Perot还是分布式反馈（Distributed Feedback，DFB）或是分布式布拉格反射器（Distributed Bragg Reflector，DBR）LD谐振腔。考虑工作条件，LD可以工作在连续发光（CW）模式、直接调制模式（通过电流注入）、脉冲、或是自脉冲模式（无源模式锁定）。此外，设计工程师可能只关注特定LD工作区域的L-I-V特性，例如近阈值区、中等输出功率区、高输出功率区等。最后，所需的设计参数也会影响模型的选择，例如，电光转换效率、阈值电流和垂直或水平光发散角等。

一个LD设计工程师根据所有这些因素来选择合适的模型，是一个相当复杂的任务。为了帮助选择模型，我们下面先按照模型的维度介绍LD模型的分类。

如第1章所述，光子器件模型（包括LD模型），可以按不同方式分类。在本章中，我们将按求解发光物理过程的方程的空间维数对模型分类，并介绍这些模型的异同：即零维（0D）、一维（1D）、二维（2D）和三维（3D）模型。在LD中，光子和电流载流子间的相互作用产生光增益。局部光子和载流子浓度，还与器件内的温度分布有关。因此，典型的LD模型包括电部分和光部分，还包括自洽计算器件内温度分布的热求解器。实际上按照维度给LD模型分类有些困难，因为LD模

型可以包括一个 2D 光部分和一个 3D 电部分。在本章中，为了避免混淆，我们分开按模型的每一部分的维数讲解，而不是将所有部分都按一个维度处理。

通常，更精确的模型有更高的空间维数，因而需要更多的计算资源，如图 8.1 所示。一般来说，0D 模型比全 3D 模型精度低。不过，0D 模型有更好的计算效率。LD 模型也可以按照时域分类，即 CW、时域和空域模型（见图 8.1）。CW 模型通常要比时域和空域模型计算效率更高，不过可提供的 LD 工作参数比较少。

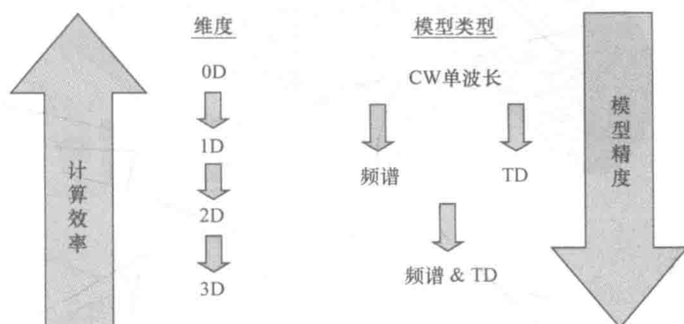


图 8.1　单激射模容器模型

0D 模型因此常常用于初始参数域搜索和初始设计。在 0D 模型中，空间维数由化简假设减小到一个点。常用的化简假设是，LD 工作模的空间分布计算中，可以忽略增益分布造成的折射率扰动。最普通的 0D LD 模型基于速率方程[2,11,12]。高级的 0D 模型基于密度矩阵法[3]。

1D LD 模型有三种：一个纵向和两个横向模型。为了清楚起见，图 8.2 所示为 EELD 和 VCSEL 的横向和纵向模型，谐振腔中光的传播方向为纵向。纵向 1D 模型常用于 LD 模式锁定的研究，而垂直 1D 模型常用于 EELD 延晶结构的最初设计阶段。

对 2D 模型，两种常用的模型为纵向或水平模型，或是横向模型。前一个模型主要用于 EELD 的脊形波导设计，而后一种主要用户高功率光锥和大面积 EELD。

3D 模型很少用于设计 EELD。这是因为 LD 结构的尺寸较大，因此应用 3D 模型的计算效率很低。准 3D 模型所需的计算内存和 CPU 时间也会较大。对 VCSEL，另一方面，因为 VCSEL 的阱结构较小，所以 3D 模型的计算效率较高，经常用于设计过程中。

在下面各节中，我们将更详细的阐述并举若干实例，说明 0D、1D 和更高维度的 LD 模型。

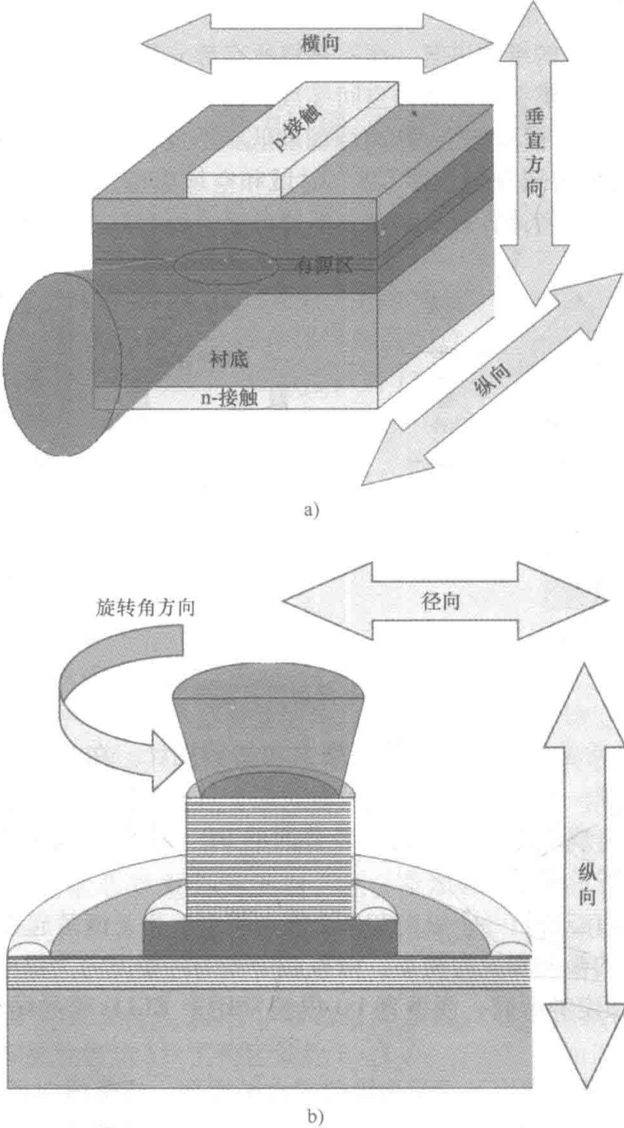


图 8.2 a) EELD 示意图 b) VCSEL 示意图

8.2 0D LD 模型

0D LD 模型基于若干化简假设。这些假设很难在实际情况中判断其合适与否。虽然如此，在设计中采用更高级、精确和预测性的模型之前，0D LD 模型因其在参数空间中进行初始搜索的高计算效率，对设计依然有巨大的帮助。LD 的教科书中也用0D 激光器模型讲解 LD 的基本工作原理[11,16,17]。在关注特定应用的实例之

前，时域 0D 模型用于双稳态激光器分析[18]，频域 0D 模型用于高速激光器的初始设计[19] 和噪声分析[20]。0D 模型还可以用于分析耦合腔激光器[21] 和注入现象[22]，以及锁相激光器[23]。

在本节中，我们考虑若干个 0D 速率方程模型的实例，并介绍 CW、时域和频谱模型的显著区别。多种方法可以推导出 0D 速率方程[16,24]。这里我们从现象入手，采用容器模型[16]。容器模型基于如下假设：LD 发光的过程可以表示为两个容器：激射模式的光子容器，和电流载流子容器如图 8.3 所示。

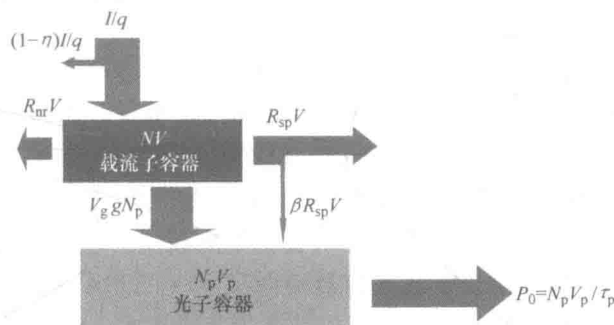


图 8.3　简单激射模式容器模型

载流子容器代表了 LD 偏置电流注入量子阱（Quantum Well，QW）的过程。一些载流子注入 QW 并不会和光子发生相互作用，可以认为它们“损失掉了”。考虑这一现象，模型用“η”表示电流注入效率。从载流子容器流出的载流子通过若干渠道消耗。一种渠道是通过受激发射到激射模式，进入光子容器。还有一些载流子会通过若干种非辐射复合，以及自发辐射损失掉。自发辐射光的一部分和激射光模式耦合，其余的形成激光器腔的其他光模式，而并不会与光子容器耦合。

通过以上讨论，我们可以推导出 QW EELD 的速率方程。我们首先考虑载流子速率方程。载流子容器尺寸如图 8.4 所示。

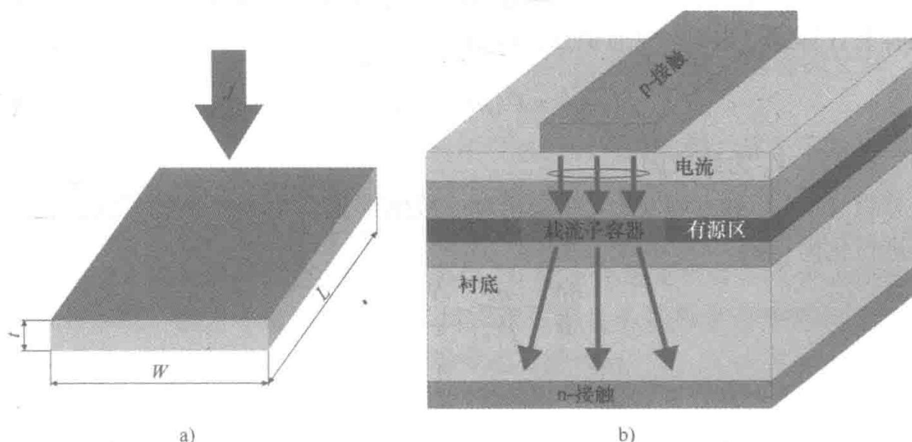


图 8.4　a）载流子容器尺寸　b）量子阱 EELD 内载流子容器的物理位置

为了得到载流子速率方程，我们考虑载流子密度的瞬态变化率、载流子容器内的载流子净产生率和通过载流子容器一侧的载流子净通量（与第5章和第6章推导基本方程组的方法相似）。由此，我们可得到如下方程：

$$\iiint_{V_c} \frac{dN}{dt} dV = -\iiint_{V_c} (R_{sp} + R_{st} + R_{nr}) dV + \oiint_{S_c} \frac{J}{q} dS \tag{8.1}$$

式中，N 为载流子浓度；V_c 为载流子容器体积；S_c 为容器表面积；R_{sp}、R_{st} 和 R_{nr} 分别为自发发射率、受激发射率和非辐射复合率；J 和 q 分别为电流密度和电子电荷，所以它们的比为载流子通量密度。我们假设 N、R_{sp}、R_{st} 和 R_{nr} 在载流子容器内为常数。这是一个相对严格的假设，我们将在下一节中更详细的对其进行讨论。同时，我们假设 J 在载流子容器表面为常数，它是 LD 偏置电流和载流子容器最上层表面的比：$\eta I/(Lw)$。其中 L 和 w 分别为载流子容器的长和宽（见图 8.4），I 是 LD 偏置电流，它为载流子容器提供载流子，η 为载流子注入效率。我们注意到上一个电流密度表达式忽略了通过载流子容器侧壁的载流子通量浓度，考虑有源区厚度（图 8.4 中的 t）远远小于载流子容器横向尺寸（图 8.4 中的 w 和 L），所以对 QW EELD 结构，可以忽略。由此，我们计算积分后从式（8.1）得到

$$\frac{dN}{dt} = -(R_{sp} + R_{st} + R_{nr}) + \frac{\eta I}{qV_c} \tag{8.2}$$

同样，我们可以得到光子容器中，瞬态光子密度变化率和光子产生率的光子速率方程：

$$\iiint_{V_p} \frac{dN_p}{dt} dV = \iiint_{V_c} (\beta R_{sp} + R_{st}) dV - \iiint_{V_p} R_l dV \tag{8.3}$$

式中，N_p 为光子密度；V_p 为光子容器体积；β 为自发发射耦合系数；R_l 为光子容器中的光子损耗率，它是因为镜面间的泄漏和自由载流子吸收造成的。同时，假设光子密度、R_{sp}、R_{st} 和 R_l 在光子容器内连续（也对载流子容器成立），从而我们可以很容易计算式（8.3）中的积分，得到

$$\frac{dN_p}{dt} = \Gamma(\beta R_{sp} + R_{st}) - R_l \tag{8.4}$$

式中，$\Gamma = V_c/V_p$ 为约束因子。

方程（8.2）和方程（8.4）是相对一般的形式。为了便于我们的讨论，我们对其进行化简得到

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\eta I}{qV_c} - \frac{N}{\tau} - v_g g N_p$$

$$\frac{dN_p}{dt} = \left[\Gamma v_g g - \frac{1}{\tau_p}\right] N_p + \Gamma\beta \frac{N}{\tau} \tag{8.5}$$

式中，v_g 为光子在阱中的群速度；g 为增益；τ_p 为光子寿命；τ 为载流子寿命。方程（8.5）对比方程（8.2）和方程（8.4），有很多额外的近似。不过，这些近似

不会影响其数值解对下节中 0D 建模的一般性。有关方程（8.5）的近似和参数更深入的讨论可以参考 LD 的标准教科书[11,12,16]，我们只在下面进行简短的叙述。

在一个 QW EELD 中，载流子容器的长度和厚度，可分别设为近似等于 LD 的长度和 QW 的厚度。载流子容器的宽度很难估计。在最初的例子中，可以假设其等于 p 侧触点的宽度。更载流子在 LD 横截面上展开的精确估计和仿真，需要使用第 5 章中的漂移扩散模型描述。

电流会造成 LD 辐射复合和非辐射复合。非辐射复合率主要受俄歇复合和间接复合（Shockley - Read - Hall，SRH）的影响。LD 建模的参考书中可找到两种过程的定量表达式，更详细的知识请参考半导体物理和半导体器件建模的相关书籍[12]。在方程（8.5）中，我们假设非辐射复合可忽略不计。

群速度为激射模式中的光子速度。理论上，群速度定义为横模的传播常数对某一角频率的导数。如果 LD 横截面（横截面时相对激射模的传播方向而言）的折射率分布已知，则可以直接用模求解器计算这一参数。一般流程包括，用第 3 章讨论的数值方法计算 LD 工作波长附近若干角频率的传播常数，内插求解，并计算其导数。为了得到精确的结果，需要计算 LD 每一层折射率的材料色散。

每单位长度的增益测量时 LD 最重要的参数。其值可以通过 Hakki - Paoli 方法计算和测量。通常测量与计算相结合进行。即，用 Hakki - Paoli 方法测量增益与频谱的相关曲线[25,26]，然后用增益计算矫准这一参数。增益计算一般包括两步。首先，用量子力学方法计算电子动量和能量的关系[27]。然后，用黄金准则计算增益的值。有关增益计算的更详细的讲解可参阅文献 [3，16]。

约束因子给出了光子和载流子容器的重叠测量。它定义为载流子容器体积和光子容器体积的比。这个定义虽然提供了这个参数的内在意义，但并没有给出其计算方法。有关计算约束因子的更多方法可参阅文献 [12]。我们在本章下一节中将介绍若干计算约束因子的实践方法。

光子寿命代表激光腔内一次泵浦过程结束后（关闭偏置电流）光子消耗的速度。考虑腔内光子放大过程，可以相对简单的估计出这个参数，请参阅文献 [12] 的第 2 章。

自发发射耦合系数，定义了自发发射耦合进激射模的比例。这个系数无法直接计算。若干论文提出了一些方法解决这个问题，如文献 [12] 的 4.4 节。除此以外，自发发射耦合系数可以认为是光电流接近阈值时实验曲线的拟合参数。此外，在频谱模型中，自发发射耦合系数可以用作 LD 输出光谱宽度计算值和实验测量值之间的拟合参数。因为增益曲线形状和自发发射耦合系数都会影响输出光谱的形状，所以耦合系数拟合应该在增益频谱拟合之后进行。

速率方程中的另一个参数为自发发射率。通常，由双分子复合系数可得到这一参数[14]。这里我们用其线性近似 $R_{sp}=N/\tau$[11]。最后，自发发射率可以近似等于 $R_{st}=v_g g N_p$[11,12]。

在以上有关速率方程的预备讨论后，我们下面考虑三种0D LD模型：CW模型、时域模型和频谱模型。

8.2.1 0D CW 模型

在CW模型中，我们考虑在DC偏置，光子密度为常数时速率方程（8.5）的解。这样的条件下，方程（8.5）可以化简为

$$0=\frac{\eta I}{qV_{\mathrm{c}}}-R-v_{\mathrm{g}}gN_{\mathrm{p}}$$

$$0=\left[\Gamma v_{\mathrm{g}}g-\frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}}\right]N_{\mathrm{p}}+\Gamma\beta R_{\mathrm{sp}} \tag{8.6}$$

在求解方程（8.6）的解之前，我们首先将方程变换为如下形式：

$$N=\frac{\frac{\eta I}{qV}+v_{\mathrm{g}}aN_{\mathrm{tr}}N_{\mathrm{p}}}{\frac{1}{\tau}+v_{\mathrm{g}}aN_{\mathrm{p}}} \tag{8.7a}$$

$$N_{\mathrm{p}}=N_{\mathrm{p}}\exp\left\{\left(\Gamma v_{\mathrm{g}}aN_{\mathrm{tr}}\left(\frac{N}{N_{\mathrm{tr}}}-1\right)+\Gamma\beta\frac{1}{\tau}\frac{N_{\mathrm{tr}}}{N_{\mathrm{p}}}\frac{N}{N_{\mathrm{tr}}}-\frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}}\right)\frac{2L}{v_{\mathrm{g}}}\right\} \tag{8.7b}$$

式中，L为腔长（见图8.3）。在下一节研究多维模型时，这个形式的重要性显而易见。方程（8.7）可以进一步变形为

$$\frac{N}{N_{\mathrm{tr}}}=\frac{\frac{\tau\eta I}{qVN_{\mathrm{tr}}}+\tau v_{\mathrm{g}}aN_{\mathrm{p}}}{1+\tau v_{\mathrm{g}}aN_{\mathrm{p}}}=\frac{E+AN_{\mathrm{p}}}{1+AN_{\mathrm{p}}} \tag{8.8a}$$

将式（8.8a）代入式（8.7）可得

$$N_{\mathrm{p}}=N_{\mathrm{p}}\exp\left\{\left(B\left[\frac{E+AN_{\mathrm{p}}}{1+AN_{\mathrm{p}}}-1\right]+\frac{C}{N_{\mathrm{p}}}\frac{E+AN_{\mathrm{p}}}{1+AN_{\mathrm{p}}}-D\right)\right\} \tag{8.8b}$$

式中，$A=\tau v_{\mathrm{g}}a$；$B=2L\Gamma aN_{\mathrm{tr}}$；$C=2L\Gamma\beta N_{\mathrm{tr}}/(v_{\mathrm{g}}\tau)$，$D=2L/(v_{\mathrm{g}}\tau_{\mathrm{p}})$，$E=\tau I\eta/(N_{\mathrm{tr}}qV)$。方程（8.8b）只有五个不相关参数，远少于方程（8.7b）。而且，N_{p}是方程（8.8b）中唯一的未知数，所以这个方程可以解出N_{p}。当N_{p}已知，就可以从方程（8.8a）解出载流子密度。方程（8.8a）可以用任何求解非线性代数方程的常规数值解法，如定点法（FPM），和牛顿-拉富生法（N-R法）求解。显然，方程（8.8a）还可以得到解析解，我们可以对方程进行变形得到

$$-DA\,N_{\mathrm{p}}^{2}+[BE-B+CA-D]N_{\mathrm{p}}+CE=0 \tag{8.9}$$

二次方程（8.9）很容易求解。它的零点为$N_{\mathrm{p}}=(b\pm\sqrt{b^{2}+4DACE})/(2DA)$，其中$b=BE-B+CA-D$。因为$DACE$和$CE$积恒大于零，且$|b|<\sqrt{b^{2}+4DACE}$，所以取正平方根时，$N_{\mathrm{p}}$为正，取负平方根时，$N_{\mathrm{p}}$为负。因此，正平方根的解是有物理意义的解，而负平方根的解是伪解。我们还注意到，只有在增益和复合拟合函数项为线性时，方程（8.8b）才存在解析解。一般情况下，方程

(8.6) 只能用数值方法求解。我们在本章中考虑两种代表性的数值方法求解方程 (8.8b)。

首先，我们考虑 FPM。为此，我们对方程 (8.8b)，设以下定点序列：

$$N_{\mathrm{p}}^{n+1}=N_{\mathrm{p}}^{n}\exp\left\{\left(B\left[\frac{E+AN_{\mathrm{p}}^{n}}{1+AN_{\mathrm{p}}^{n}}-1\right]+\frac{C}{N_{\mathrm{p}}}\frac{E+AN_{\mathrm{p}}^{n}}{1+AN_{\mathrm{p}}^{n}}-D\right)\right\} \tag{8.10}$$

为了更好地理解 FPM，我们首先分析一下序列 (8.10)。定点序列收敛的充分必要条件，是方程 (8.6) 右侧 (RHS) 的导数的绝对值，在解附近要小于 1[28]。

例如，我们考虑 $In_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs$ 的 QW 激光器，它设计工作在 980nm 波长附近（请参阅文献 [12] 的“时域模型”一节）。我们用线性模型逼近载流子密度和增益的关系：$g=a(N-N_{\mathrm{tr}})$，其中线性增益系数 $a=7.88\times10^{-16}\mathrm{cm}^2$，透明载流子浓度 $N_{\mathrm{tr}}=1.8\times10^{18}/\mathrm{cm}^3$。所有本节中所用建模参数的值见表 8.1。

表 8.1　砷化镓激光器二极管参数值

v_{g}	$(3/4.7)\times10^{10}\mathrm{cm/s}$	群速度
d	8nm	量子阱(QW)宽度
w	2μm	波导宽度
L	0.25mm	腔长
V	$4\times10^{-12}\mathrm{cm}^3$	有源区腔体积 = Lwd
Γ	0.032	束缚因子
N_{tr}	$1.8\times10^{18}1/\mathrm{cm}^3$	透明载流子密度
a	$7.88\times10^{-16}\mathrm{cm}^2$	线性增益系数
τ	2.71ns	载流子寿命
τ_{p}	2.77ps	光子寿命
λ	980nm	波长
β	0.869×10^{-4}	自发发射系数
η	1	电流注入效率
R	0.32	端面反射率

图 8.5 所示为具有表 8.1 参数的 LD 在一定偏置电压下，方程 (8.10) 的 RHS 与光子密度之间的关系。

式 (8.6) 的 RHS 与直线 $N_{\mathrm{p}}=N_{\mathrm{p}}$ 的交叉点就是式 (8.10) 的解。可以看到，即使偏置电流非常小，这条线 $N_{\mathrm{p}}=N_{\mathrm{p}}$ 的倾角也大于 45°。这表明，FPM 只在偏置电流相对较小时才会收敛。图 8.6 中的结果验证了这个结论。

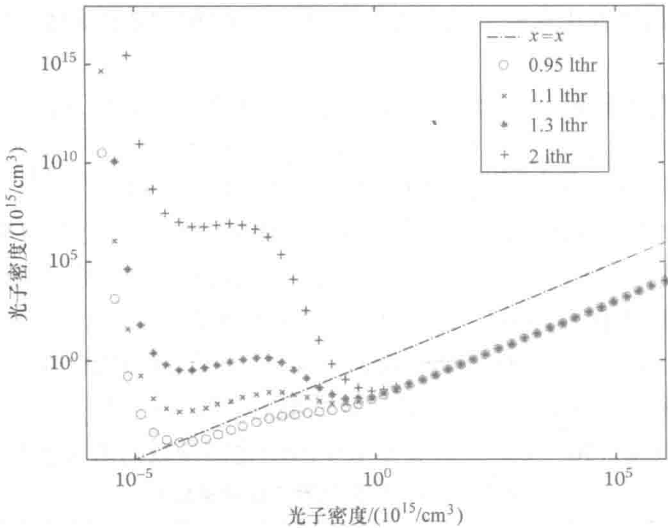


图 8.5　方程（8.8b）的 RHS 图
（美国光学学会月刊 B，2007. 24（4）：1053－1060 页，稳态高功率
半导体激光器建模的稳定性，Sujecki，S）

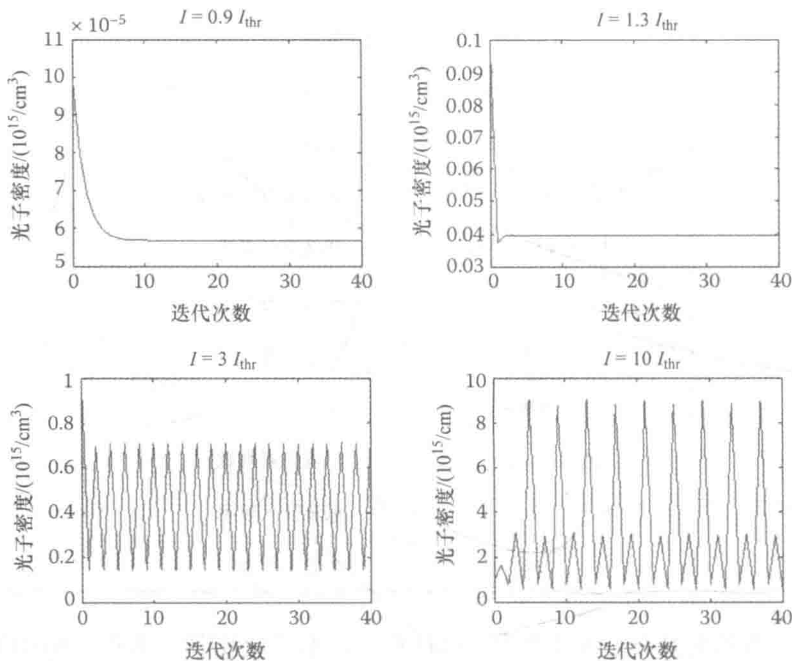


图 8.6　方程（8.10）定义的序列定点法的光子密度和迭代次数之间的关系
（美国光学学会月刊 B，2007. 24（4）：1053－1060 页，稳态高功率
半导体激光器建模的稳定性，Sujecki，S）

算法8.1　FPM求解方程（8.8）

1. 开始；
2. 设置建模参数；
3. 计算光子密度 N_p^0 的初始值；
4. 由方程（8.11）求 N_p^{n+1}；
5. 如果 $|\vec{N}^{i+1}-\vec{N}^{i}|$ 跳转到4；
6. 结束。

图8.6给出了四组偏置电流下，定点法迭代次数和光子浓度 N_p 之间的关系。接近激光器阈值时，FPM快速收敛。但是当偏置电流较大时，FPM无法收敛，围绕解出现振荡。糟糕的是，即使偏置电流较小，也无法收敛，所以方程（8.10）定义的FPM序列实用性不大。不过，对式（8.10）的FPM序列做一个微小的完善，就可以保证在任意电流值下均收敛。我们在式（8.10）中引入参数 p，得到如下序列：

$$N_p^{n+1}=N_p^n\exp\left\{\left(B\left[\frac{E+AN_p^n}{1+AN_p^n}-1\right]+\frac{C}{N_p}\frac{E+AN_p^n}{1+AN_p^n}-D\right)p\right\} \tag{8.11}$$

容易验证，引入参数 p 不会改变满足方程（8.10）的 N_p 的值。基于方程（8.11）的FPM的实现算法如下所示。

算法8.1的MATLAB代码如下：

```
% semiconductor laser analysis using 0D rate equations
% 0D steady state analysis - fixed point method
clear
format long e
pi = 3.141592653589793e+000;

h = 6.626e-34;%[Js]
q = 1.609e-19;%[C]
V = 4e-12;%[cm3]
gamma = 0.032;%confinement factor
betasp = 1e-4;%spontaneous emission
vg = 3e10/3.9;%[cm/s]
v0 = 3e10;
lam = 1.3e-4;%[cm]
freq = v0/lam;%[1/s]
tau = 0.5e-9;%[s]
L = 0.025;% cavity length [cm]
Rf = 0.32;% mirror reflectivity front
Rb = 0.32;% mirror reflectivity back
taup = 2*L/(vg*log(1/(Rf*Rb)));
%[s] = 1/(alfam*vg);alfam = (ln(1/R))/L
neta = 0.7;%[current injection efficiency
Ntr = 2.1e+18;% [1/cm3]
alfam = 1/(vg*taup);
% cavity optical loss (no scattering loss)
I =.002;% total current [A]
```

```
alfam = 1/(vg*taup);%no scattering loss

a_gain = 8.;% 1/gain curvature coefficient [(nm*cm^1/2)]
a = 2.1e-15;% gain coefficient [cm2]
alam = a*ones(1,1);

iter_no = 40;% number of iterations
% iteration loop
a_e(1) = neta*I/(q*V);a_e(2) = -1/tau;a_e(3) = -vg*a;
a_e(4) = vg*a*Ntr;
b_e(1) = gamma*vg*a;b_e(2) = -gamma*vg*a*Ntr;
b_e(3) = gamma*betasp/tau;
b_e(4) = -1/taup;

x = 2.571210747598624e+015*ones(1,1);%initial photon density
suma = sum(vg*alam.*x);
y = (-a_e(1)-suma*Ntr)/(-suma+a_e(2));%initial carrier density

relax_par = 0.6;
for k = 1:iter_no
          x = exp((b_e(1)*y.*alam/a+b_e(2)*alam/a+b_e(3)*...
          y./x+b_e(4))*relax_par*L/vg).*x;
          photons(:,k) = x;
     suma = sum(vg*alam.*x);
     y = (-a_e(1)-suma*Ntr)/(-suma+a_e(2));
     carriers(k) = y;
end
```

在以上代码中，为了简单器件，我们限制了迭代次数，而没有进行算法 8.1 的第 4 步的余差检查。当然，如果需要，可以很容易在代码中加入余差检查。

图 8.7 所示为由 8.11 定义序列的 FPM 计算得到的光子密度和迭代次数之间的关系。我们取 10 倍的阈值电流做偏置，得到计算结果。P 有两个参数值。$p=1$，相当于使用式（8.10）的序列，以及 $P=0.5$。当 $p=1$ 时，程序无法收敛。而 $p=0.5$ 时，可以收敛。实际上，从式（8.11）可以看出，p 减少了与光子密度相乘的系数，所以会减小方程（8.11）RHS 的导数与直线 $N_p=N_p$ 交点的值。所以，由方程（8.11）得到的 FPM 可以计算速率方程（8.6）的解。我们注意到收敛率与任意参数 p 密切相关。幸运的是，通过试错，不难选择合适的 p 值。这是因为 p 的取值范围只在（0，1）之间。此外，相对较大的 p 值（接近 1），会得到一个震荡序列。而较小的 p 值（接近 0），会得到一个非常慢收敛的序列。

为了做对比，我们同样用牛顿法（NM）求解方程（8.8）。图 8.8 所示为两种偏置电流值情况下，光子密度与 NM 迭代次数之间的关系。在临界阈值和大偏置电流的情况下，收敛速度都较快。即，在初始条件邻近解的时候，NM 有二次项收敛率。当远离解的时候，NM 收敛率较低。采用第 6 章讨论过的全局 NW 法可以解决这个问题。不过，需要注意的是，在远离解的情况下，NW 算法可能会收敛于伪解。方程（8.8b），实际上有三个等于零的点。图 8.9 中，方程（8.8b）的 RHS

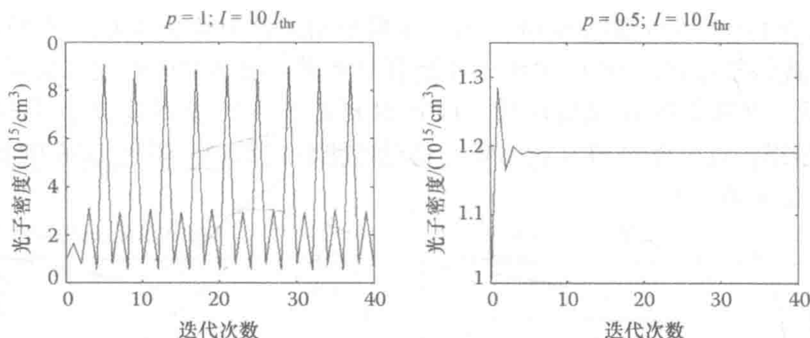


图 8.7　光子密度和方程（8.1）定义序列的 FPM 迭代数之间的关系

图出现了光子密度为负的值。$N_p = N_p$ 直线的内插对应了方程（8.8b）的零点。其中有一个光子密度等于零的解。在方程（8.6）到方程（8.8b）的推导中，隐含地出现了这一平凡解。而另外两个解，我们在讨论方程（8.9）时已经提及。其中一个伪解对应了光子密度为负，它是数值算法本身产生的伪解。而另一个有物理意义的解对应了光子密度为正。所以在 NR 迭代过程中，NM 算法可能会收敛于方程（8.8b）无物理意义的解，或是遇到数值下溢或上溢而收敛。使 NM 算法收敛于有物理意义解的标准方法为引入松弛变量[29]。

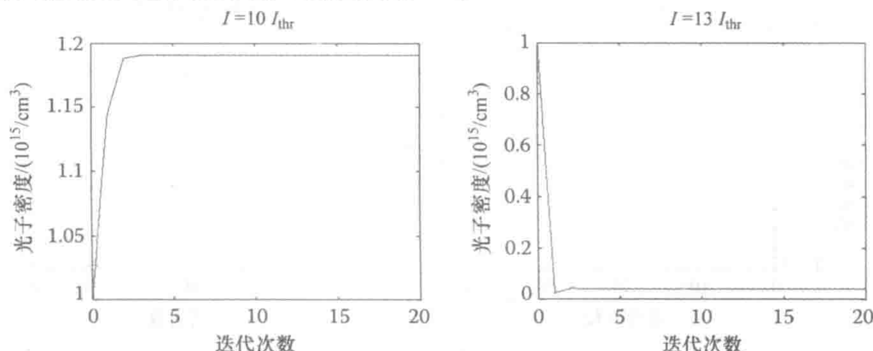


图 8.8　牛顿法的迭代次数与光子密度的关系

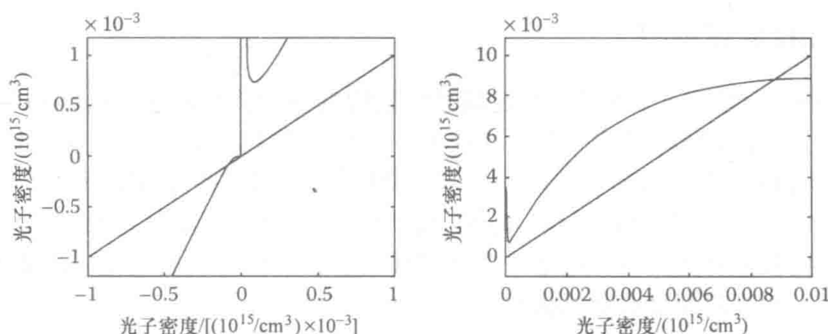


图 8.9　方程（8.8b）的 RHS 图

采用 NR 法的难点如图 8.10 所示。如果初始条件距离解太原，则 NR 无法收敛。当距离解较近时，NR 收敛率一开始会非常慢，逐渐增速得到二次项收敛率。另一方面，如果参数 p 取最优值，FPM 对初始条件的敏感度会小很多（见图 8.11）。所以，可以得到 FPM 比 NM 的稳健性更好的结论。不过 FPM 的收敛率和参数 p 的值关系很大。

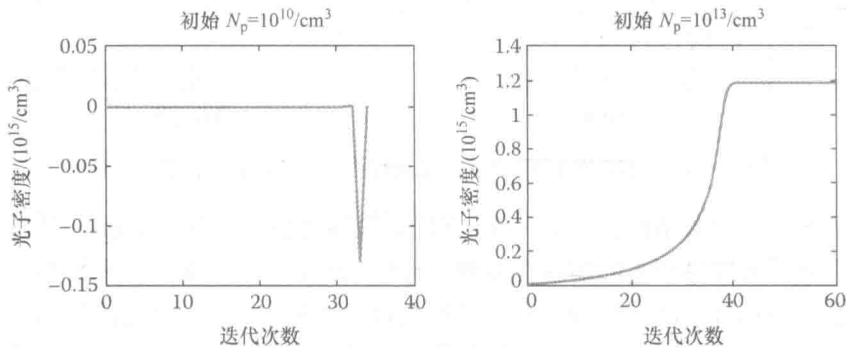


图 8.10 牛顿法在 $I=10I_{th}$ 时的迭代次与光子密度之间的关系

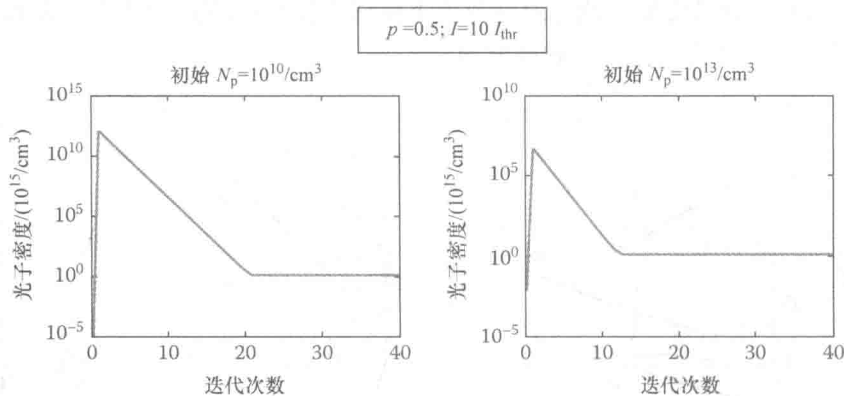


图 8.11 FPM 迭代次数与光子密度的关系

8.2.2 0D 时域模型

CW 模型只能用于研究 LD 在定偏置电流情况下的特性，这时的输出功率不随时间变化。而在许多实际应用中，LD 处于脉冲工作模式，例如直调和模式锁定时[4]。为了研究在这样的工作状态下 LD 的性质，我们需要时域建模工具。在本章中，我们考虑一个 0D 时域模型。时域分析用于求解两对常微分方程（8.5）。就我们讨论过的数值算法而言，这是一个很直接的求解，因为该问题是一个初值问题。作为实例，我们使用显式欧拉法对常微分方程求积：

$$N(t_{n+1})=N(t_n)+\Delta t\left(\frac{\eta I(t_n)}{qV}-\frac{N(t_n)}{\tau}-v_g a(N(t_n)-N_{tr})N_p(t_n)\right)$$

$$N_{\mathrm{p}}(t_{n+1}) = N_{\mathrm{p}}(t_n) + \Delta t\left(\left[\Gamma v_{\mathrm{g}} a(N(t_n) - N_{\mathrm{tr}}) - \frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}}\right] N_{\mathrm{p}}(t_n) + \Gamma\beta\frac{N(t_n)}{\tau}\right) \tag{8.12}$$

式中，Δt 为步长。方程（8.12）与方程（8.6）类似，我们使用了线性增益近似。欧拉法求解方程（8.5）的实现过程如算法 8.2 所示。

算法 8.2　欧拉法求解方程（8.5）

1. 开始；
2. 设置建模参数；
3. 给定偏置电流，计算光子密度 $N_{\mathrm{p}}(t_0)$ 的初始值和载流子密度 $N(t_0)$ 的初始值（用如 FPM）；
4. 由方程（8.12）求 $N_{\mathrm{p}}(t_{n+1})$ 和 $N(t_{n+1})$；
5. 如果 $t_{n+1} < t_{\mathrm{final}}$，跳转到 4；
6. 结束。

算法 8.2 所对应的 MATLAB 代码如下：

```
% semiconductor laser analysis using 0D rate equations
% TD analysis
clear
format long e
pi = 3.141592653589793e+000;

h = 6.626e-34;%[Js]
q = 1.609e-19;%[C]
V = 4e-12;%[cm3]
gamma = 0.032;%confinement factor
betasp = 1e-4;%spontaneous emission
vg = 3e10/3.9;%[cm/s]
v0 = 3e10;
lam = 1.3e-4;%[cm]
freq = v0/lam;%[1/s]
tau =.5e-9;%[s]
L = 0.025;% cavity length [cm]
Rf = 0.32;% mirror reflectivity front
Rb = 0.32;% mirror reflectivity back
taup = 2*L/(vg*log(1/(Rf*Rb)))
%[s] = 1/(alfam*vg);alfam = (ln(1/R))/L
neta = 0.7;%[current injection efficiency
Ntr = 2.1e+18;% [1/cm3]
alfam = 1/(vg*taup);
% cavity optical loss (no scattering loss)
I =.006;% total current [A]

alfam = 1/(vg*taup);%no scattering loss
```

```
a_gain = 8.;% 1/gain curvature coefficient [(nm*cm^1/2)]
a = 2.1e-15;% gain coefficient [cm2]
alam = a*ones(1,1);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% initial bias point calculation
iter_no = 40;% number of iterations
% iteration loop
a_e(1) = neta*I/(q*V);a_e(2) = -1/tau;a_e(3) = -vg*a;
a_e(4) = vg*a*Ntr;
b_e(1) = gamma*vg*a;b_e(2) = -gamma*vg*a*Ntr;
b_e(3) = gamma*betasp/tau;
b_e(4) = -1/taup;

x = 2.571210747598624e+015*ones(1,1);%initial photon density
suma = sum(vg*alam.*x);
y = (-a_e(1)-suma*Ntr)/(-suma+a_e(2));%initial carrier density

relax_par = 0.6;
for k = 1:iter_no
         x = exp((b_e(1)*y.*alam/a+b_e(2)*alam/a+b_e(3)…
         *y./x+b_e(4))*relax_par*L/vg).*x;
         photons(:,k) = x;
    suma = sum(vg*alam.*x);
    y = (-a_e(1)-suma*Ntr)/(-suma+a_e(2));
    carriers(k) = y;
    k
end

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Time domain analysis
x = (photons(:,iter_no));% initial photon distribution
y = carriers(iter_no);% intitial carrier distribution
Num_of_TS = 10000;% Number of time steps
Current = 0.02*ones(1,Num_of_TS);%Driving current waveform
for j = 1:Num_of_TS/100
    Current(j) = I;
end

dt = 0.4e-12;%time step for Euler method
for mk = 1:Num_of_TS
    a_e(1) = neta*Current(mk)/(q*V);
    x = x+dt*((b_e(1)*y.*alam/a+b_e(2)*alam/
      a+b_e(4)).*x+b_e(3)*y);
    photons1(:,mk) = x;
    suma = sum(vg*alam.*x);
    y = y+dt*((a_e(1)+suma*Ntr)-y.*(suma-a_e(2)));
    carriers1(mk) = y;
end
```

仿真使用的建模参数见表8.2，参数源自 GaInNAs/GaAs QW LD[30]。

表 8.2　GaInNAs/GaAs QW 激光器二极管参数值

v_g	$(3/3.9)\times10^{10}$cm/s	群速度
d	8nm	QW 宽度
w	2mm	波导宽度
L	0.25mm	腔长
V	4×10^{-12}cm^3	有源区腔体积 = Lwd
Γ	0.032	束缚因子
N_{tr}	2.1×10^{18}1/cm^3	透明载流子密度
a	2.1×10^{-15}cm^2	线性增益系数
τ	0.5ns	载流子寿命
τ_p	2.85ps	光子寿命
λ	1300nm	波长
β	1×10^{-4}	自发发射系数
η	0.7	电流注入效率
R	0.32	端面反射率
$\Delta\lambda$	0.87nm	谐振波长线宽

我们使用算法 8.2，计算在 LD 偏置过程中，光子和载流子密度随时间的关系。偏置电流波形如图 8.12 所示，光子和载流子密度波形如图 8.13 所示。时间步长为 0.2ps。结果显示了预期的加电延迟和振荡，如文献［12］的第 5 章所述。欧拉法需要非常短的时间步长，可以通过常微分方程高级积分算法缓解这个要求[31]。

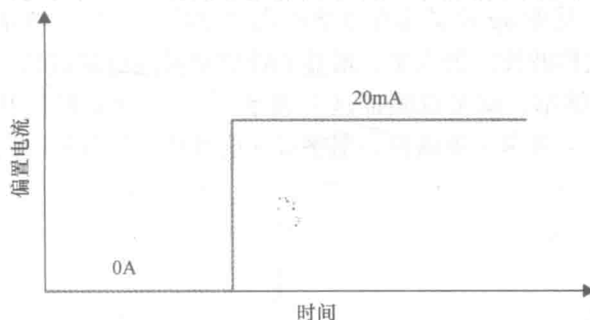


图 8.12　偏置电流波形，结果在图 8.13 中

8.2.3　0D 光谱模型

在典型的 LD 频谱中，同时存在若干条纵模激射现象。前面各节介绍过的模型并不合适研究 LD 输出功率谱和偏置电流的关系。为此，我们需要在速率方程（8.5）中引入多纵模[11,32]：

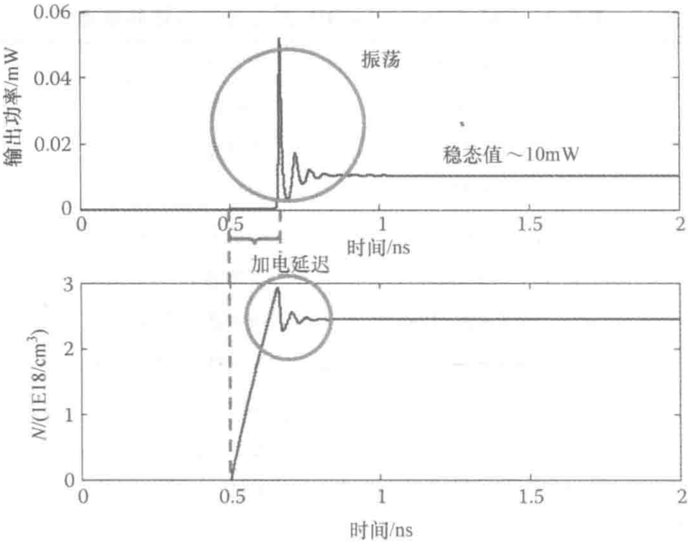


图 8.13 光子和载流子密度波形

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\eta I}{qV} - \frac{N}{\tau} - v_g \sum_n [a(N - N_{tr}) - dg^2(\lambda_p - \lambda_n)^2] N_p(\lambda_n)$$

$$\frac{dN_p(\lambda_n)}{dt} = \left\{\Gamma v_g[a(N - N_{tr}) - dg^2(\lambda_p - \lambda_n)^2] - \frac{1}{\tau_p}\right\} N_p(\lambda_n) + \Gamma\beta \frac{N}{\tau} \tag{8.13}$$

在式 (8.13) 中，线性增益近似可以写为增益与波长的关系：$g_n = a(N - N_{tr}) - (dg)^2(\lambda_p - \lambda_n)^2$，其中 dg 定义为靠近增益峰值波长 λ_p 和 λ_n 的增益曲率，其波长为第 n 条纵模的工作波长。公式中，增益和峰值增益附近的波长存在平方关系。如果 LD 输出谱宽足够窄，就可以验证这个关系[11]。式 (8.13) 中的序号“n”标记纵模。例如，如果考虑 7 条纵模，则序号 n 应该从 -3 到 3，如图 8.14 所示。

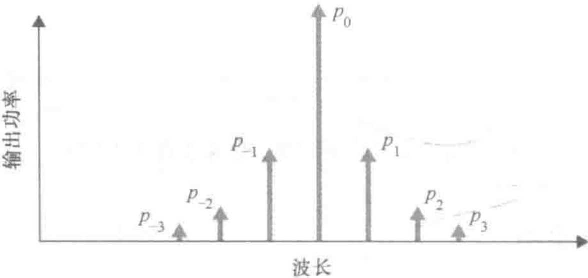


图 8.14 LD 输出功率谱示意图

在稳态时，8.13 的 LHS 的导数等于零，并存在以下方程：

$$0 = \frac{\eta I}{qV} - \frac{N}{\tau} - v_{\mathrm{g}} \sum_{n} [a(N - N_{\mathrm{tr}}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2] N_{\mathrm{p}}(\lambda_{\mathrm{n}})$$

$$0 = \left\{ \Gamma v_{\mathrm{g}}[a(N - N_{\mathrm{tr}}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2] - \frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}} \right\} N_{\mathrm{p}}(\lambda_{n}) + \Gamma\beta \frac{N}{\tau} \tag{8.14}$$

和“0D CW 模型”相似，方程（8.14）可以改写为如下形式：

$$0 = N - \frac{\dfrac{\eta I}{qV} + v_{\mathrm{g}} \sum_{n} [aN_{\mathrm{tr}} - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2] N_{\mathrm{p}}(\lambda_{n})}{\dfrac{1}{\tau} + v_{\mathrm{g}} \sum_{n} aN_{\mathrm{p}}(\lambda_{n})}$$

$$0 = N_{\mathrm{p}}(\lambda_{n}) - N_{\mathrm{p}}(\lambda_{n}) \exp\left\{ \left(\left[\Gamma v_{\mathrm{g}}(a(N - N_{\mathrm{tr}}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2) - \frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}} \right] + \Gamma\beta \frac{1}{\tau} \frac{1}{N_{\mathrm{p}}(\lambda_{n})} \right) \frac{2L}{v_{\mathrm{g}}} \right\} \tag{8.15}$$

方程（8.15）可以用类似FPM序列的方法求解，参照“0D CW 模型”一节，有

$$N^{i+1} = \frac{\dfrac{\eta I}{qV} + v_{\mathrm{g}} \sum_{n} [aN_{\mathrm{tr}} - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2] N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n})}{\dfrac{1}{\tau} + v_{\mathrm{g}} \sum_{n} aN_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n})}$$

$$N_{\mathrm{p}}^{i+1}(\lambda_{n}) = N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n}) \exp\left\{ \left(\left[\Gamma v_{\mathrm{g}}(a(N^{i} - N_{\mathrm{tr}}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_{\mathrm{p}} - \lambda_{n})^2) - \frac{1}{\tau_{\mathrm{p}}} \right] + \Gamma\beta \frac{1}{\tau} \frac{1}{N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n})} \right) \frac{2Lp}{v_{\mathrm{g}}} \right\} \tag{8.16}$$

方程（8.16）习惯表示成如下形式：

$$N^{i+1} = G_0(N^{i}, N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_1), \cdots, N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n}))$$

$$N_{\mathrm{p}}^{i+1}(\lambda_{n}) = G_{n}(N^{i}, N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_1), \cdots, N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n}))$$

它还可以表示成更紧凑的形式：

$$\vec{N}^{i+1} = \vec{G}(\vec{N}^{i}) \tag{8.17}$$

其中向量 $\vec{G}$ 和 $\vec{N}^{i}$ 定义为

$$\vec{G}(\vec{N}^{i}) = \begin{bmatrix} G_0(\vec{N}^{i}) \\ G_1(\vec{N}^{i}) \\ \vdots \\ G_{n}(\vec{N}^{i}) \end{bmatrix}$$

、

$$\vec{N}^{i} = \begin{bmatrix} N_0^{i} \\ N_1^{i} \\ \vdots \\ N_{n}^{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{i} \\ N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_1) \\ \vdots \\ N_{\mathrm{p}}^{i}(\lambda_{n}) \end{bmatrix}$$

如求解方程（8.16），则方程（8.15）可以用 NRM 求解。用方程（8.17）的记号，NRM 可以通过如下序列，迭代计算方程（8.15）的解：

$$\vec{N}^{i+1} = \vec{N}^{i} + \Delta\vec{N}^{i} \quad , \tag{8.18}$$

由

$$J^{i}\Delta\vec{N}^{i} = -\vec{F}^{i}(\vec{N}^{i})$$

以及

$$\vec{F}^{i}(\vec{N}^{i}) = -\vec{N}^{i} + \vec{G}(\vec{N}^{i}) = 0$$

得到 $\Delta\vec{N}^{i}$。

其中 J 为雅可比矩阵：

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_0}{\partial N_0} & \frac{\partial F_0}{\partial N_1} & \cdots & \frac{\partial F_0}{\partial N_n} \\ \frac{\partial F_1}{\partial N_0} & \frac{\partial F_1}{\partial N_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial N_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial N_0} & \frac{\partial F_n}{\partial N_1} & \cdots & \frac{\partial F_n}{\partial N_n} \end{bmatrix}$$

雅可比矩阵可用有限差分法计算[33]：

$$J = \begin{bmatrix} \frac{F_0(\vec{N}+\Delta N_0)-F_0(\vec{N})}{\Delta N_0} & \frac{F_0(\vec{N}+\Delta N_1)-F_0(\vec{N})}{\Delta N_1} & \cdots & \frac{F_0(\vec{N}+\Delta N_n)-F_0(\vec{N})}{\Delta N_n} \\ \frac{F_1(\vec{N}+\Delta N_0)-F_1(\vec{N})}{\Delta N_0} & \frac{F_1(\vec{N}+\Delta N_1)-F_1(\vec{N})}{\Delta N_1} & \cdots & \frac{F_1(\vec{N}+\Delta N_n)-F_1(\vec{N})}{\Delta N_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{F_n(\vec{N}+\Delta N_0)-F_n(\vec{N})}{\Delta N_0} & \frac{F_n(\vec{N}+\Delta N_1)-F_n(\vec{N})}{\Delta N_1} & \cdots & \frac{F_n(\vec{N}+\Delta N_n)-F_n(\vec{N})}{\Delta N_n} \end{bmatrix} \tag{8.19}$$

向量 $\vec{N}$ 加上标量 ΔN_n，可理解为在向量 $\vec{N}$ 的第 n 个元素上加上标量 ΔN_n。文献[33]中有评估雅可比矩阵（8.19）的指导，即，以 0.01% 验证 $\vec{N}$ 每个元素。雅可比矩阵（8.19）的形式适用于任意函数（或查询表）构建模型，计算载流子密度和增益/复合率关系。

图 8.15 比较了 FPM 计算的单波长光电流特性，即，基于定点序列（8.16）计

算的方程（8.8）谱模型的结果。LD 的参数与“0D 时域模型”相同。增益参数 $dg = 1/(8\text{nm cm}^{1/2})$。我们用如下公式，计算波长间隔[16]：$\Delta\lambda = \lambda^2/(2n_gL)$。计算阈值电流和斜线效率使用了两种方法，这两种方法结果一般非常相似。但是，在临近阈值时，其差别很明显。在谱模型中，阈值以上的输出功率远大于零。图 8.16 所示为 FPM 迭代次数与光子密度的关系，在执行 10000 次 FPM 之后，计算输出功率谱。结果显示，FPM 的收敛速度非常慢。

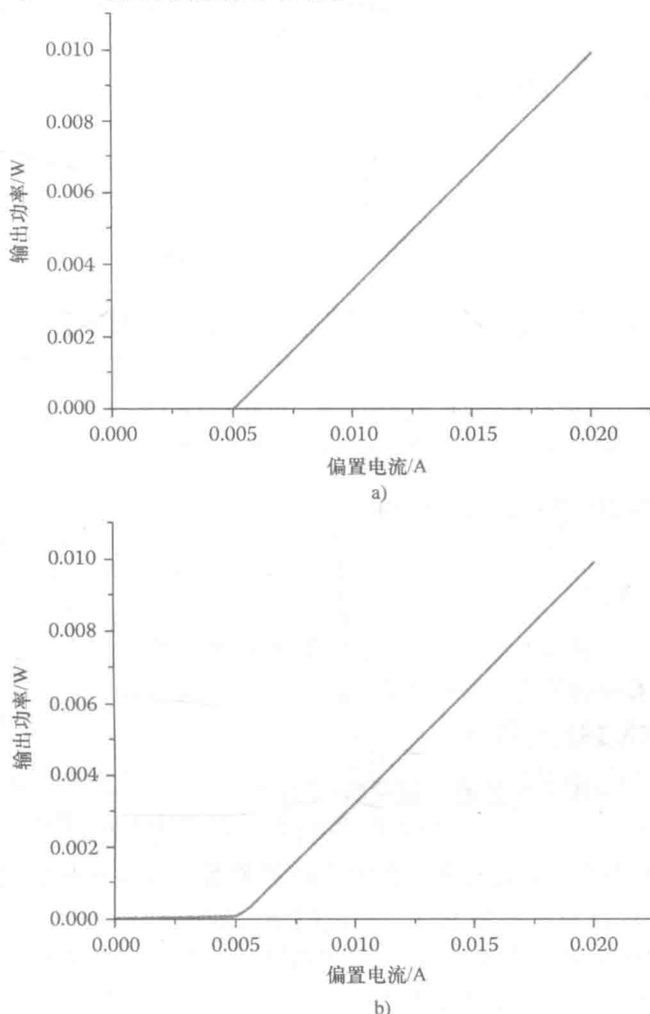


图 8.15　用两种模型计算的光电流特性

a）CW 单波长模型　b）CW 谱模型

采用 NRM（8.18）可以显著提高收敛率。不过，NRM 对初始条件很敏感。所以，我们采用 FPM 和 NM 的混合算法。FPM 获取初始条件供 NRM 使用。然后 NRM 经过几次迭代得到解。如算法 8.3 所示。

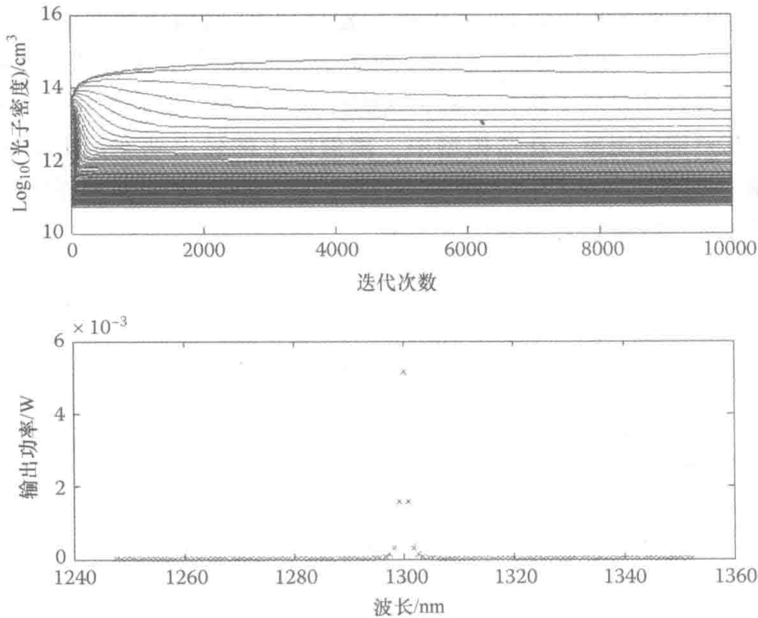


图 8.16 光子密度和迭代次数之间的关系，以及 10000 次定点迭代后得到的输出功率与波长的关系，仿真包含 121 个波长，偏置电流为 20mA

算法 8.3 NRM 求解方程（8.14）

1. 开始；
2. 设置模型参数；
3. 用定点 FPM 进行 16 次迭代，计算 $\vec{N}^i = \vec{N}^0$ 的初值；
4. 用 FPM 求得的初值进行初始 NM；
5. 用方程（8.18）计算 N_p^{n+1}；
6. 如果 $|\vec{N}^{i+1} - \vec{N}^i| >$ 公差，则跳转到 5；
7. 结束。

图 8.17 所示为迭代步长与光子密度之间的关系，以及计算的输出谱。FPM 进行了 10000 次迭代计算出初始条件，相应的结果如图 8.16 所示。NRM 通过 10 次迭代计算出稳定的结果。从图 8.16 中可以看到，FPM 进行 10000 次迭代后的输出谱，依然远不能收敛于 NRM 结合 FPM 得到的结果，见图 8.17。

本节的最后一个例子，是 0D 时域谱模型。对方程（8.13）应用欧拉法可得

$$N|_{t0+\Delta t} = N|_{t0} + \Delta t\left(\frac{\eta I|_{t0}}{qV} - \frac{N|_{t0}}{\tau} - v_\mathrm{g}\sum_n \left[a(N|_{t0} - N_\mathrm{tr}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_\mathrm{p} - \lambda_n)^2\right]N_\mathrm{p}|_{t0}(\lambda_n)\right)$$

$$N_\mathrm{p}|_{t0+\Delta t}(\lambda_n) = N_\mathrm{p}|_{t0}(\lambda_n) + \Delta t\left[\Gamma v_\mathrm{g}(a(N|_{t0} - N_\mathrm{tr}) - \mathrm{d}g^2(\lambda_\mathrm{p} - \lambda_n)^2) - \frac{1}{\tau_\mathrm{p}}\right]$$

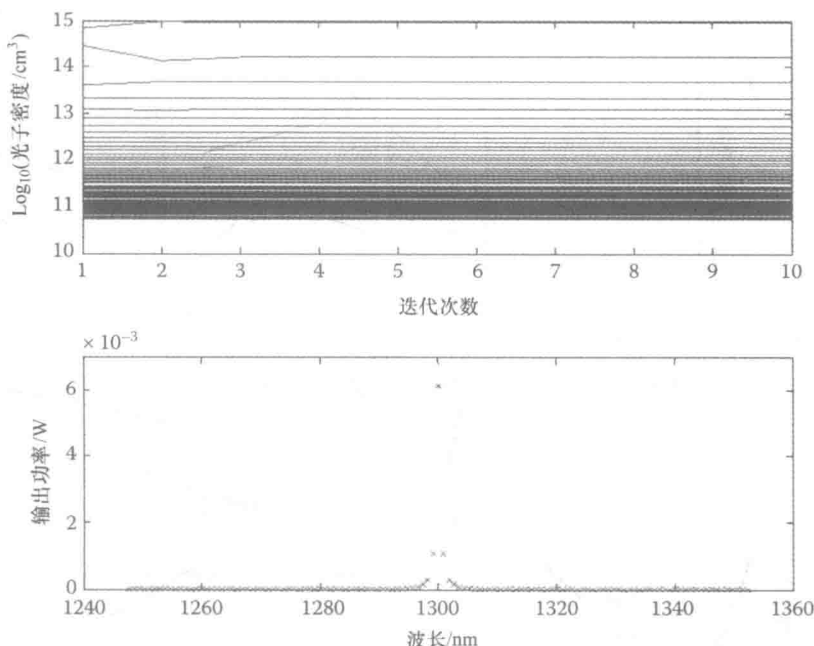


图 8.17　迭代次数与光子密度的关系，以及牛顿－拉富生法计算的输出功率与波长的相关性。仿真包含 121 个波长，偏置电流为 20mA

$$N_{\mathrm{p}}\mid_{t0}(\lambda_n)+\Gamma\beta\frac{N\mid_{t0}}{\tau} \tag{8.20}$$

由方程（8.20）求解初始条件，进而计算方程（8.13）的解得到的算法与算法 8.2 效率相当。唯一的差别在于需要考虑的方程数量。算法 8.3 可以给出给定偏置电流下，光子和载流子密度的初始值。

图 8.19 和图 8.20 表示了图 8.18 所给出的偏置电流波形下，光子、载流子密度与实践的关系，结果是基于表 8.2 所给出的模型参数求得的。计算步长为 0.4ps，波长间隔和增益参数 dg 与稳态光谱模型吸纳沟通。如单波长模型所预测的，总光子密度和载流子密度在几个纳秒内趋于稳定。不过，输出光谱的速度相对较慢，如图 8.19 和图 8.20 所示。

总而言之，光谱模型可以分析 LD 输出光谱和时间演化。不过，其计算开销与单波长模型相比有显著增加。在下节中，我们将考察激光器腔内光子和载流子分布与空间位置无关的假设是否成立。为了这个目的，下面我们推导 1D LD 模型。

8.2.4　1D 激光器二极管模型

1D LD 模型按照计算的方向分为三类（见图 8.2）。竖向模型通常用于设计 LD 的外延结构。横向模型一般用于研究大面积激光器的性能[34]、激光器阵列[35]，和 VCSEL[36]。稳态纵向模型常用于分析 DFB 激光器[37]，以及研究空间烧孔[38]。

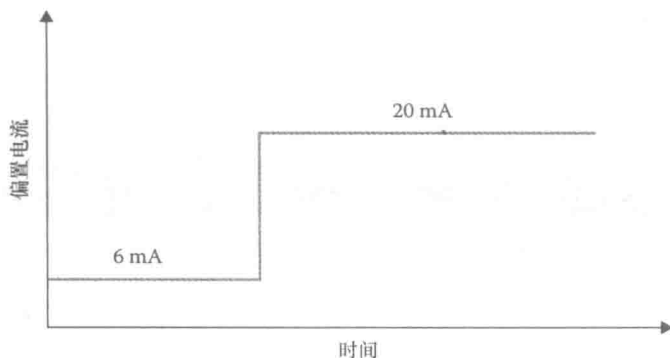


图 8.18 图 8.18 和图 8.19 中仿真时的偏置电流波形

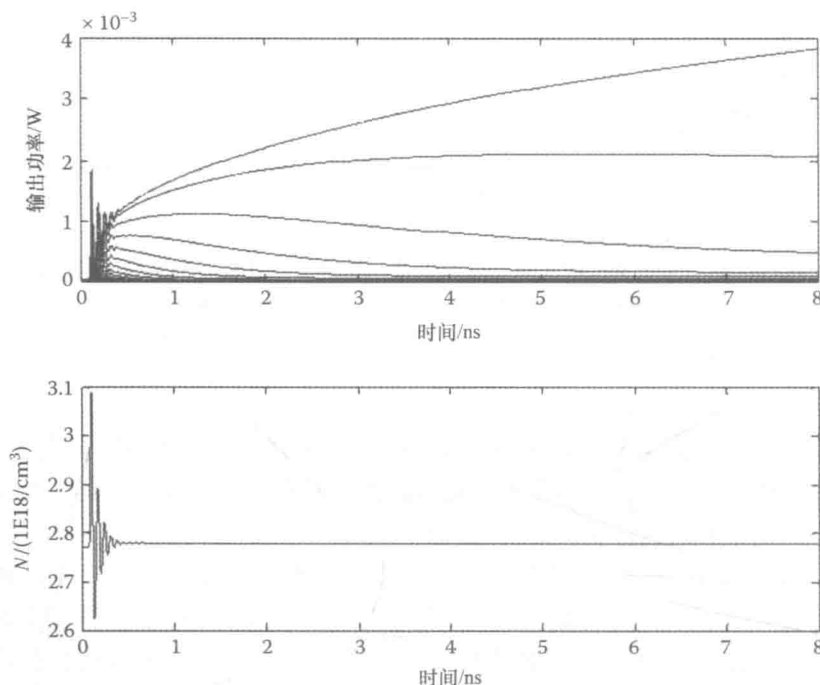


图 8.19 纵模求解光子密度和载流子密度波形

1D 时域模型在研究 LD 脉冲工作，如 Q 开关，增益开关，无源和有源模锁定中有独特的应用[4]。纵向 1D 模型还用于分析激光放大器[10,39-44]。一般的，在应用 1D 模型之后会用行波法计算腔内光子分布[45-51]。最近，延迟差分方程法取代了行波法，因为它的计算效率更高[52-54]。

在本节中，我们将用 1D CW 纵向模型作为实例讲解。为了推导 LD 腔内光子通量演进的方程，我们假设增益均为一个薄 QW 层产生。此外，文献［12］的第 6 章，我们对光波导内折射率分布 $n(x, y)$ 引入一个微小扰动 $\Delta n(x, y)$，光波在 LD 腔内以横向基模通过扰动波导。我们只考虑标量的情况，使用行波近似并将内

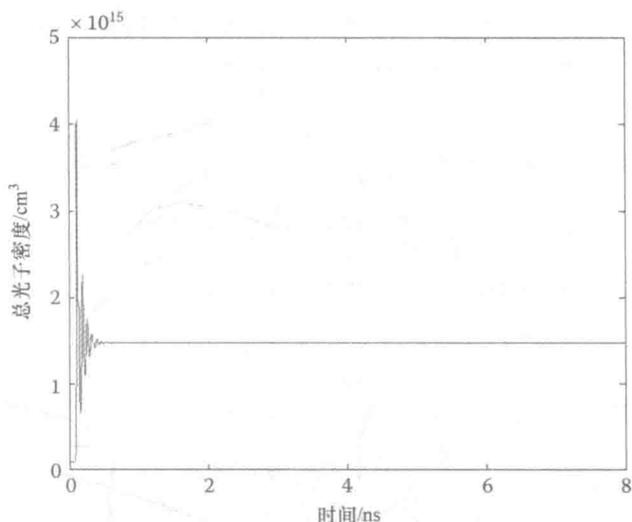


图 8.20　总光子密度波形

腔场分布分解为向前和向后两个传播波。

首先考虑向前传播波的演进方程。在我们之前的所有假设基础上，向前传播波的场分布可表示为积的形式：$\Psi(x,y,z)=A_{\mathrm{f}}(z)F(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{j}}(\omega^{t}\beta^{z})$，其中 $F(x,\ y)$ 为扰动波导的基模分布，$A_{\mathrm{f}}(z)$ 为 z 的缓变函数，β 为基模的传播常数。为了单独定义 $\Psi(x,\ y,\ z)$，我们对 $F\ (x,\ y)$ 引入如下条件：

$$\iint F^{*}(x,y)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = I_{\mathrm{N}}$$

其中"＊"为表示共轭复数。我们将 $\Psi\ (x,\ y,\ z)$ 带入标量方程（2.1），并按照"光纤方法建模"一节的步骤，参照方程（7.19），我们得到

$$\frac{\mathrm{d}P_{\mathrm{f}}(z)}{\mathrm{d}z}=\hat{\Gamma}(z)P_{\mathrm{f}}(z) \tag{8.21a}$$

其中

$$\hat{\Gamma}(z) = \frac{k_0}{\beta}\iint F^{*}(x,y)n(x,y,z)g_{\mathrm{m}}(x,y,z)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_{\mathrm{N}} \tag{8.21b}$$

对向后传播波可以按照相同的步骤推导演进方程。向前和向后波演进方程可与双极方程（6.60）和漂移扩散方程（6.11）互补，组成可按已知边界条件自洽求解的方程组。为了求解这个方程组，需要计算在整个横平面给定纵向位置的载流子浓度，与算法 7.1 类似。因此，为了得到 1D LD 模型，需要进一步化简假设。如果假设在纵向位置载流子容器的介质增益恒定不变，即 $g_{\mathrm{m}}(x,y,z)=g_{\mathrm{m}}(z)$，以外为零，则可以得到 1D 模型。方程（8.21b）可随之化简为

$$\hat{\Gamma}(z) = \frac{k_0 n_{\mathrm{qw}} g_{\mathrm{m}}(z)}{\beta}\iint_{S_{\mathrm{ct}}} F^{*}(x,y)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_{\mathrm{N}} \tag{8.22}$$

式中，n_{qw}为 QW 层的折射率值，表面积S_{ct}为载流子容器某一纵向位置上的横截面积（见图 8.4）。方程（8.22）可以进一步改写为

$$\hat{\Gamma}(z)=\Gamma g_m(z) \tag{8.23}$$

式中，与 z 无关的约束因子 Γ 表示为

$$\Gamma=\frac{k_0 n_{qw}}{\beta}\iint_{S_{ct}} F^*(x,y)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_N \tag{8.24}$$

如果模有效折射率与 QW 折射率差别不大，方程（8.24）可化简为

$$\Gamma=\iint_{S_{ct}} F^*(x,y)F(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y/I_N \tag{8.25}$$

将方程（8.23）代入方程（8.21a），可得到

$$\frac{\mathrm{d}P_f(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)P_f(z) \tag{8.26a}$$

同样，对向后传播光，我们可得到方程：

$$\frac{\mathrm{d}P_b(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)P_b(z) \tag{8.26b}$$

载流子容器界面的增益恒定的假设，包含了载流子浓度在载流子容器某一纵向位置的横截面上恒定的假设。所以，我们需要双极方程（6.60）的 1D 形式，与方程（8.26）结合，得到如下方程组：

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}P_f(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)P_f(z)\\ \dfrac{\mathrm{d}P_b(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)P_b(z)\\ \dfrac{\mathrm{d}^2N(z)}{\mathrm{d}z^2}+\dfrac{N(z)}{\tau}+v_g g_m(z)N_p(z)+\dfrac{J(z)}{qd}=0\end{cases} \tag{8.27}$$

在方程（8.27）中，我们按照 0D 模型相同方法对复合率进行近似。为了求解方程（8.27），我们需要知道向后和向前波传播功率和光子密度 N_p。这两个值可以从方程（7.6）和方程（7.26）求得

$$\begin{aligned}N_{p,f}(z)&=\Gamma P_f(z)/(v_g twh\nu)\\ N_{p,b}(z)&=\Gamma P_b(z)/(v_g twh\nu)\end{aligned} \tag{8.28}$$

式中，v_g 为模的群速度，载流子容器横截面表面积等于 tw（见图 8.4）. 将向前和向后传播光的光子密度相加，可以得到总光子密度 N_p：

$$N_p(z)=N_{p,f}(z)+N_{p,b}(z) \tag{8.29}$$

用方程（8.28）可以化简向前和向后传播方程（8.27），得到

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}N_{p,f}(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)N_{p,f}(z)\\ \dfrac{\mathrm{d}N_{p,h}(z)}{\mathrm{d}z}=\Gamma g_m(z)N_{p,b}(z)\end{cases} \tag{8.30}$$

研究 EELD 的特性时，可以忽略纵向载流子扩散。由此

$$\frac{N(z)}{\tau} + v_g g_m(z) N_p(z) + \frac{J(z)}{qd} = 0 \tag{8.31}$$

可以补全方程（8.30）。

方程（8.30）需要以下边界条件才可以求解：

$$N_{p,b}(z=0) = R_R N_{p,f}(z=0) \tag{8.32a}$$

$$N_{p,f}(z=L) = R_F N_{p,b}(z=L) \tag{8.32b}$$

式中，R_F 和 R_R 分别为面侧和背侧的反射率。

由此，理论上，方程（8.30）和方程（8.31）可以用第 7 章的算法求解。不过，对 LD 而言，还存在使用更广泛的另一种算法。为了推导这种算法，我们首先介绍纵向离散化（见图 8.21）。

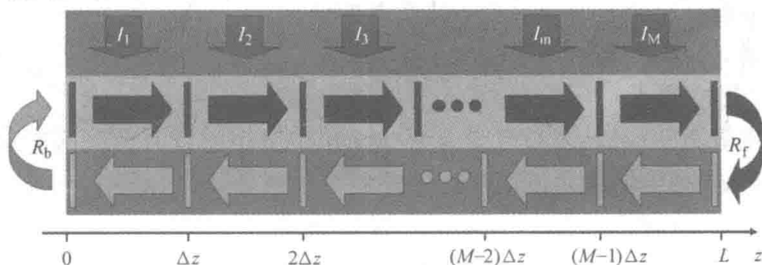


图 8.21　纵向离散化过程示意图

由纵向离散化（见图 8.21），方程（8.31）可以局部化简为常系数常微分方程。所以，在每个纵向分段中，材料增益为常数：

$$\begin{cases} \dfrac{dN_{p,f}(z)}{dz} = \Gamma g_m(z_0) N_{p,f}(z) \\ \dfrac{dN_{p,b}(z)}{dz} = \Gamma g_m(z_0) N_{p,b}(z) \end{cases} \tag{8.33}$$

因而，方程（8.33）可以局部求解析解：

$$N_{p,f}(z_0 + \Delta z) = \exp(g_m(z_0)\Delta z) N_{p,f}(z_0) \tag{8.34a}$$

$$N_{p,b}(z_0 - \Delta z) = \exp(-g_m(z_0)\Delta z) N_{p,b}(z_0) \tag{8.34b}$$

对脊形波导 EELD，引入纵向离散化后，方程（8.31）可以进一步简化为

$$\frac{N(z)}{\tau} + v_g g_m(z) N_p(z) + \frac{I}{q\Delta z w d\, M} = 0 \tag{8.35}$$

式中，M 为离散化后的纵向分段数（见图 8.21）。方程（8.35）可以在已知光子密度的前提下，计算载流子浓度。

我们现在用耦合解法（CSM）[55] 结合方程（8.35）求解方程（8.34）。CSM 求解方程（8.34）和方程（8.35）的算法如算法 8.4 所示。

算法 8.4　CSM 求解方程（8.34）和方程（8.35）

1. 开始；
2. 设置建模参数；
3. 设置 $z=0$ 处 N 和 $N_{p,f}$ 的值；
4. 对所有 z 设置 $N_{p,b}=0$
5. 用方程（8.34a）以及最新的 $N_{p,b}$ 值计算 $z=z+\Delta z$ 处 $N_{p,f}$ 的值；
6. 用方程（8.35）计算目前 z 位置 N 的值；
7. 如果 $z<L$，跳转到 5；
8. 用方程（8.32b）进行计算；
9. 用方程（8.34）和最新的 $N_{p,f}$ 值计算 $z=z-\Delta z$ 处 $N_{p,b}$ 的值；
10. 用方程（8.35）计算目前 z 位置 N 的值；
11. 如果 $z>L$，跳转到 9；
12. 用方程（8.32a）进行计算；
13. 如果最新的和初始的 $N_{p,f}$ 在 $z=0$ 处的值的差，大于预先定义的余差，则设置 $z=0$ 处的 $N_{p,f}$ 值为最新的值，并跳转到 5；
14. 结束。

表 8.3　GaAs QW 激光器二极管的参数

向侧反射率	$R_f=0.1\%$
背侧反射率	$R_b=95\%$
波长	$l=980\text{nm}$
透明载流子	$N_{tr}=2\times10^{18}$ [1/cm³]
增益截面	$a=4\times10^{-15}$ [cm²]
群速度	$v_g=10^{10}$ [cm/s]
束缚因子	$\Gamma=0.006$
量子阱宽度	$W_{QW}=10\times10^{-7}$ [cm]
激光器腔长	$L=0.2$ [cm]
激光器体积	$V=6\times10^{-10}$ [cm³]
载流子寿命	$\tau=0.7$ [ns]
初始光子密度	10^{15} [1/cm³]

向前传播光的光子密度初始值，以及在 $z=0$ 处的载流子密度初始值，可以由“0D CW 模型”一节中讨论的 0D 模型计算。

表 8.4 总结了 732nm 高功率 LD 的 1D CSM 仿真。在偏置电流是阈值电流 10 倍时，CSM 法收敛。仿真参数见表 8.3。

表 8.4　40 纵向切片的 CSM 仿真结果

偏置电流 [I_{th}] =	0.95	1.015	1.1	1.2 - 10
CSM	√	√	√	√

应用算法时需要在考虑到 CSM 一个重要的性质。即 CSM 的稳定性和收敛率与

纵向切片数量密切相关[56]。实际上，当纵向切片数量小于某一最小值 M 时，CSM 将算法无法收敛。这个最小纵向切片数与 LD 的参数有关。图 8.21 所示为所研究的 LD 结构（见表 8.3）前传播波的光子密度，在背端与迭代数（往返数）之间的关系。偏置电流为阈值的 10 倍（约等于 3.4A）。当纵向切片数较小时，CSM 无法收敛，进入一个与 $p=1$ 的 0D FPM 相同的循环中。当增加纵向切片数量时，CSM 算法可以收敛，如图 8.22 所示。

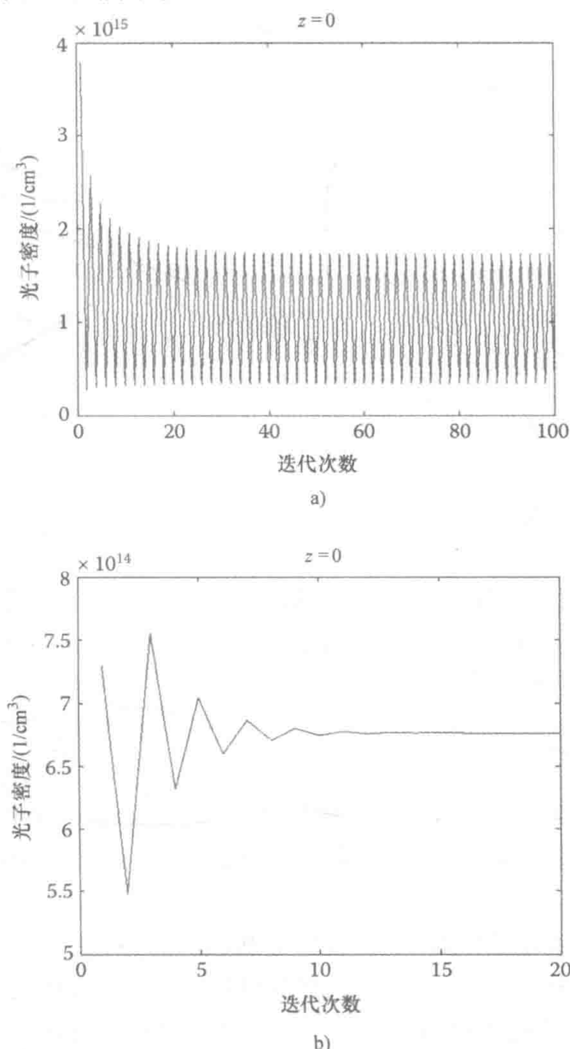


图 8.22　在偏置电流 $I=10I_{th}$时，CSM 迭代次数与 $z=0$ 处光子密度的关系

a）四个纵向切片　b）10 个纵向切片。

（美国光学学会月刊 B，2007.24（4）：1053－1060 页，稳态高功率半导体激光器建模的稳定性，Sujecki，S）

最后，在图 8.23 中，我们可以看到向前和向后传播波的光子密度与纵向位置

的关系。显而易见，两个波的光子密度相差两个量级。而且，光子密度与纵向位置关系密切，而其分布并不以腔中心 $z = L/2$ 对称。

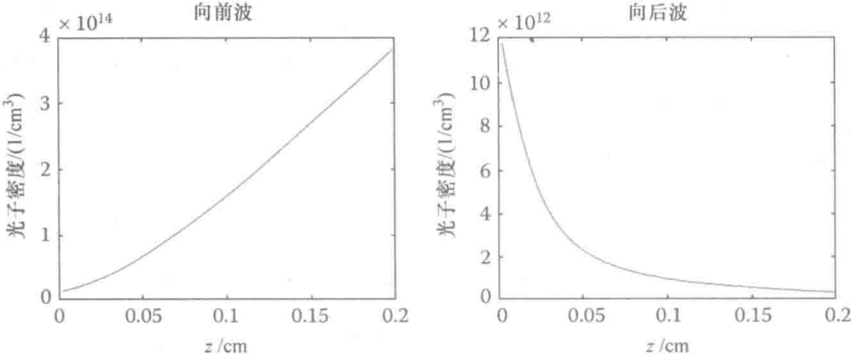


图 8.23 向后和向前波的光子密度与纵向位置之间的关系。结果为在偏置电流 $I = 2I_{\mathrm{thr}}$，100 个纵向切片的 CSM 仿真所得

1D 空间 LD 分析比 0D 分析提供了更多 LD 工作的信息。不过，另一方面，其无法预测更复杂腔结构的输出光束参数。因此，现在设计激光器二极管多采用多维模型。我们下面一节将讨论这些模型。

8.3 多维 LD 模型

多维 LD 模型通常包括光、电和热的部分，还包括高级增益模型。不仅如此，模型的电部分还包含相对复杂的束缚载流子和非束缚载流子相互作用[57,58]。而每个部分的空间维度也会各不相同。从计算效率考察，多维模型的计算效率比 0D 和 1D 模型低。所以，多维模型大多用于设计流程的最终阶段，用以优化 LD 设计关键参数。

VCSEL 因其和 EELD 相比，空间维度相对较小，而在设计中多使用多维模型。如果可能的话，多维 VCSEL 模型中激光器结构旋转对称，其沿着径向求解电和热扩散方程[59-61]。

更先进的模型还可以求解沿着纵向的电和热扩散方程[62,63]。当旋转对称性不存在时，需要使用 3D VCSEL 模型。这种模型对贝塞尔函数和三角函数乘积做适当的展开[64,65]，或者直接使用 FDTD 法[66]，对光场做模式分解，也求解载流子和温度的分布。

在脊形波导 EELD 中比较常用的多维模型，是由漂移扩散方程（6.11）和光子速率方程（8.4）相结合得到的[29]。用模求解器求解光场分布已经在第 3 章做过讨论。因此，其 LD 模型中相对直接的包含了向量模求解器[67]。在 QW 激光器中，束缚载流子和非束缚载流子之间的相互作用，可以由量子载流子捕获 - 逃逸模

型描述[57,58]。

但考虑大功率大面积激光器或是锥形激光器的光束演进时，不论是独立器件还是外腔形式，通常模型包含至少一个 2D 电部分和光部分，沿着横向和纵向直接计算载流子和光子分布[68-70]。模型的光部分将腔内部光子分布表示为两个中心传播光波的叠加。这样的模型用于优化低功率锥形腔 LD 的发光质量[71]，研究载流子和温度分布的影响，自发辐射引起的光丝效应[74]，以及载流子和光子的空间瞬态动态性[76]。2D 高功率 LD 模型计算效率相对较高。为了分析瞬态动态性，需要使用时域模型[77-79]。不过，因其计算效率低，高功率激光器时域模型实际不包含漂移扩散方程。该方程的求解，可以通过稳态模型的准 3D 近似求解[55,80]。

下面，我们对准 3D 高功率锥形激光器模型举实例讲解。对结构的讨论有助于理解开发多维 LD 模型的复杂程度。这个模型包括一个 3D 电部分，用以求解漂移扩散方程（6.11），模型忽略了纵向载流子扩散和 2D 光部分。这个准 3D 模型可与 3D 热扩散模型互补。

锥形激光器包含一个直波导部分和锥形放大器部分，如图 8.24 所示。直波导部分（有时和束流片在一起）起到了模隔离器的关键作用，保证锥形放大器只放大直波导的横向基模。锥形放大器部分可以逐渐将光束向低功率密度展开。为了减小负面效应（如空间烧孔），可以增大总输出功率和灾变光镜面损伤（Catastrophic Optical Mirror Damage，COMD）阈值。

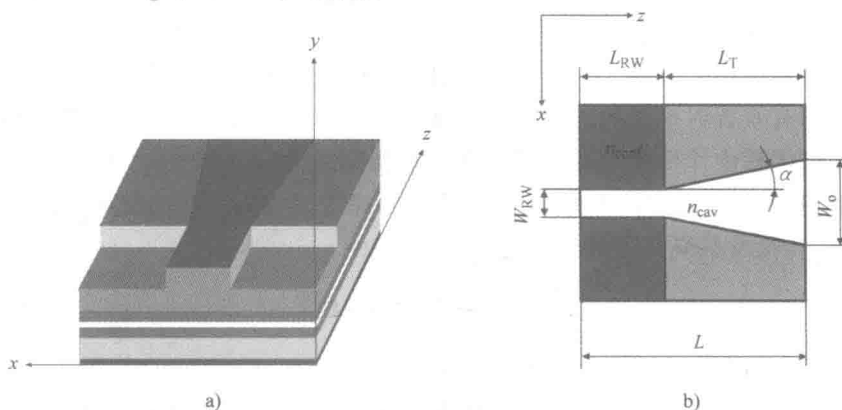


图 8.24　a）锥形激光器结构　b）锥形激光器的 2D 有效折射率分布

锥形激光器的腔长为数毫米（大于 1000 倍波长）因此，直接使用 3D 麦克斯韦求解器计算时间会变得极其长。另一方面，0D 和 1D 速率方程模型无法处理高功率锥形边发射激光器的设计问题，因为这些模型无法重建光束质量劣化的现象。唯一可以解决这些冲突的方法是使用光束传播法（BPM），参考本书第 4 章，BPM 可以通过将腔内光场分布表示为两个反向传播波的叠加形式，处理腔内的光束传播。此外，应用 BPM 可以更详细的分析稳态非线性光子 - 载流子 - 温度相互作用，

以及确定光丝和空间烧孔效应的源头。

为了推导准 3D 模型，我们首先推导 2D 光模型。我们依照实验所确认的，边发射半导体激光器的光是偏振向固定的线偏振光这一结果，在第一阶近似中忽略偏振耦合，并求解半向量方程而不是向量波动方程。此外，平面浅刻蚀脊形夹层波导的结构可以用有效折射率法加速计算（见图 8.24）。该近似忽略了竖向扩散，不过竖向扩散不会在设计和制造良好的高功率 EELD 中起到很大的作用。因此，对 x 极化模，在腔内的波传播遵照方程（4.6c）和方程（4.6d）。同样的，对 y 极化模，我们也可以用方程（4.6a）和方程（4.6b）（参考图 8.24）。

将腔内场分解为向前和向后传播波的组合，参考式（4.9）：

$$\frac{\partial F_{\mathrm{f}}}{\partial z}=-\mathrm{j}\sqrt{L+\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon}\,F_{\mathrm{f}} \tag{8.36a}$$

$$\frac{\partial F_{\mathrm{b}}}{\partial z}=\mathrm{j}\sqrt{L+\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon}\,F_{\mathrm{b}} \tag{8.36b}$$

式中，F_{f} 和 F_{b} 为向前和向后传播波电磁场的相关分量（参考“引言”一节）。对求解方程（8.36），理论上，可以使用第 4 章讨论过的任何一种 BPM 算法。但是，矩阵展开 FD – BPM 算法的效率最高[55]。

有效折射率的横向分布与腔内载流子和温度分布有关。当综合 FD – BPM 算法时，因为需要计算每个横向 FD 网格节点的有效折射率，所以计算的数值开销较大。不过，对比无扰动波导的有效折射率绝对值，腔内载流子和温度分布造成的有效折射率扰动很小。所以，一般在刚开始计算有效折射率时，不考虑载流子和温度分布造成的有效折射率扰动。然后，再考虑通过垂直约束因子，改变载流子和温度分布，用微扰理论计算扰动带来的影响（参阅文献［12］的附录 14）。举例说明，我们对理想的电场，推导 TE 模的 Γ_{v}。在不考虑电场横向扰动的情况下，参照方程（3.39a），传播常数满足方程

$$\frac{\partial^{2}Y}{\partial y^{2}}+\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon_{0}n^{2}Y=\beta^{2}Y \tag{8.37}$$

式中，n 为“无扰动波导的”参考折射率分布。

我们现在计算折射率非常小的扰动 Δn，对场分布 Y 和传播常数 β 带来的影响。设折射率扰动对场分布造成的微小扰动为 ΔY，对传播常数造成的微小扰动为 $\Delta\beta$。则扰动场满足方程：

$$\frac{\partial^{2}(Y+\Delta Y)}{\partial y^{2}}+\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon_{0}(n+\Delta n)^{2}(Y+\Delta Y)=(\beta+\Delta\beta)^{2}(Y+\Delta Y) \tag{8.38}$$

截取二阶扰动项，并用方程（8.37），可得：

$$\frac{\partial^{2}\Delta Y}{\partial y^{2}}+\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon_{0}n^{2}\Delta Y-\beta^{2}\Delta Y+2\omega^{2}\mu_{0}\varepsilon_{0}n\Delta nY=2\beta\Delta\beta Y \tag{8.39}$$

在 Y 上加符号“ * ”表示其共轭复数。对 y 积分为

$$\int Y^* \left(\frac{\partial^2 \Delta Y}{\partial y^2} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n^2 \Delta Y - \beta^2 \Delta Y \right) \mathrm{d}y + 2\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 \int n \Delta n Y^* Y \mathrm{d}y = 2\beta \Delta\beta \int Y^* Y \mathrm{d}y \tag{8.40}$$

如果当 y 趋近于无穷大时，ΔY 和 Y 趋近于零，则有下面等式：

$$\int Y^* \frac{\partial^2 \Delta Y}{\partial y^2} \mathrm{d}y = \int \Delta Y \frac{\partial^2 Y^*}{\partial y^2} \mathrm{d}y$$

如果 n 为纯实数，则 Y^* 满足式（8.37），由此可得

$$\int Y^* \left(\frac{\partial^2 \Delta Y}{\partial y^2} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n^2 \Delta Y - \beta^2 \Delta Y \right) \mathrm{d}y = \int \Delta Y \left(\frac{\partial^2 Y^*}{\partial y^2} + \omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n^2 Y^* - \beta^2 Y^* \right) \mathrm{d}y = 0$$

所以方程（8.40）变为

$$\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 \int n \Delta n Y^* Y \mathrm{d}y = \beta \Delta\beta \int Y^* Y \mathrm{d}y \tag{8.41}$$

如果折射率扰动只出现在 QW 区内，则由 8.41，我们可得 $\Delta\beta$ 为

$$\Delta\beta = \frac{\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n_{qw} \int_{qw} \Delta n Y^* Y \mathrm{d}y}{\beta \int Y^* Y \mathrm{d}y} \tag{8.42}$$

式中，n_{qw}为 QW 的折射率值。假设 Δn 在 QW 内与 y 无关，则可得到最终表达式：

$$\Delta\beta = \frac{\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 n_{qw} \Gamma_v \Delta n}{\beta} \tag{8.43}$$

式中，垂直约束因子 Γ_v 定义为

$$\Gamma_v = \frac{\int_{qw} Y^* Y \mathrm{d}y}{\int Y^* Y \mathrm{d}y} \tag{8.44}$$

方程（8.43）计算得到的 $\Delta\beta$ 可以用于计算方程（8.36）的有效折射率分布：

$$n_{eff} = \frac{\beta + \Delta\beta}{\omega \sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \tag{8.45}$$

所以，β 和 Γ_v 只需在仿真开始时计算，然后用方程（8.35）计算有效折射率分布。

为了从方程（8.45）计算有效折射率分布，我们需要知道方程（8.43）中的折射率扰动 Δn，只有在载流子和温度已知的情况下，才能确定这个量。激光腔内的载流子浓度，可以求解自洽的电子空穴电流连续性方程，和泊松方程确定（参见方程（6.6）和方程（6.11））：

$$\mathrm{div}\, \vec{J}_n - q(R_{nr} + R_{sp} + F_n^{qw}) = 0 \tag{8.46a}$$

$$\mathrm{div}\, \vec{J}_p + q(R_{nr} + R_{sp} + F_p^{qw}) = 0 \tag{8.46b}$$

$$\mathrm{div}(\varepsilon_s grad\ \varphi) + q(p - n + N_D - N_A) = 0 \tag{8.46c}$$

式中，R_{nr}和R_{sp}分别为体区域的非辐射复合率和自发复合率；$\vec{J}_n$ 和$\vec{J}_p$ 分别为电子和空穴电流密度；p 和 n 为电子和空穴浓度；N_D 和 N_A 代表施主和受主浓度；φ 为电势分布；连续性方程中的 F_n^{qw} 和 F_p^{qw} 项，表示了束缚态和非束缚态之间的载流子捕获－逃逸率，它们和方程（8.46），以及每个 QW 的连续性方程联立，可得：

$$\int_{qw} F_n^{qw} dv - R_{nr}^{qw} + R_{sp}^{qw} + R_{st} = 0$$

$$\int_{qw} F_p^{qw} dv - R_{nr}^{qw} + R_{sp}^{qw} + R_{st} = 0,$$

式中，R_{nr}^{qw}，R_{sp}^{qw}，和 R_{st}为 QW 区内非辐射复合、自发复合和受激复合率。

腔内温度分布可以由热传导方程计算（参见方程（5.5））：

$$\nabla(-\kappa\nabla T) = Q \tag{8.47}$$

式中，κ 为热传导率；W 为发热率。假设晶格上的载流子处于热平衡状态。

方程（8.46）的电流密度包含标准漂移扩散项和热梯度项。对 QW 内的 2D 载流子，满足费米－狄拉克分布。对体区域内的载流子，满足波尔兹曼分布。在仿真开始时，先对价带做能带混合计算，然后对能带参数拟合后的增益做抛物线能带近似。由激射波长的洛伦兹展宽函数计算局部材料增益，该函数时局部温度、电子和空穴浓度的函数。自发发射、非平衡载流子复合，以及俄歇复合率，通过表传表达式计算[12]，并考虑温度相关性。热模型将焦耳、非辐射复合和自由载流子吸收视为方程（5.3）中的局部热源，与所谓的超量功率共同满足能量守恒[81]。更多有关电和热模型的知识请参考[81,82]。

在增益接近最大值时，折射率扰动的实部与载流子浓度的平方根呈正比[83]。实验可证明该结论[81]。所以，两者的关系可以纳入模型中。折射率的实部与温度的关系也可以通过拟合实验数据纳入模型中[81]。

用于求解模型电、热，和光部分的标准算法是 CSM。该算法已经在 8.2.4 节“1D 激光器二极管模型”中讨论过了[84]。图 8.25 所示为 CSM 算法分析高功率锥形 LD。算法分析在背侧初始化。前向传播波到面侧光场演进可由 BPM 求得。方程（8.46）和方程（8.47）用上一个光子密度结果，

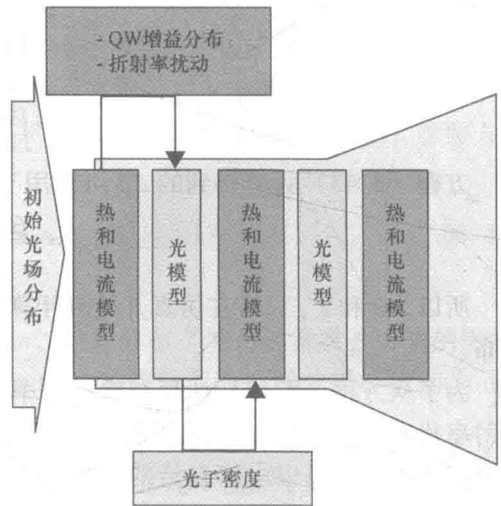


图 8.25　耦合求解法的流程

求解每个纵向位置的 2D（包括两个横向，参见图 8.2a）新的腔内载流子、电势和温度分布。在计算面侧波反射分布后，可以用方程（8.36b）计算返回波的演进。

重复这个过程，直到每次迭代的背面波反射场光子密度不再改变为止。收敛极限没有考虑入射波的相位。该简化还是基于在模间波长间隔内，折射率和光增益没有显著变化的假设。所以，在计算中如何选择波长是一个问题。我们采用每个电流值对应的增益最大的波长作为发射波长。

以高功率锥形激光器结构为例，选择工作在 732nm。表 8.5 列出了工作为 732nm 的 GaAs 激光器各层的参数。腔结构有一个 4°增益导引锥和一个 3μm 宽的脊形波导。脊形波导的长度和锥增益部分的长度分别为 0.75 和 1.25mm。背侧反射率为 95%。外层平板有效折射率随刻蚀深度改变。脊形波导部分为深刻蚀，折射率比为 0.02。锥形部分为增益导引。结果发表在 Sujecki 等人的文献[55]中。更多有关此模型的信息请参考 Borruel 等人文献[87]。本节中的模型还可成功用于分析图形化触点的锥形激光器[88]，设计单管激光器，研究外腔激光器，以及解释 n－接触成像的结果[90]。

仿真所用的材料参数来自参考文献 [50，51]。如果找不到 GaAsP 的参数，也可以在 QW 部分采用 GaAs 的典型参数。表 8.6 总结了仿真默认的最重要的参数，它们在仿真中不变。

表 8.5　激光器腔延晶结构

层	材料	厚度/nm	掺杂/cm^{-1}	折射率
p－接触材料				
p－触层	GaAs		p＋	3.741
p 包层	$Al_{0.70}Ga_{0.30}As$		p	3.229
p 波导	$Al_{0.65}Ga_{0.35}As$	500	p	3.263
QW	$GaAs_{0.67}P_{0.33}$	9	n	3.585
n 波导	$Al_{0.65}Ga_{0.35}As$	500	n	3.263
n 包层	$Al_{0.70}Ga_{0.30}As$		n	3.229
n 缓冲区＋衬底	GaAs		n	3.741
n－接触金属				

表 8.6　仿真参数

材料性质		
能带偏移 $\Delta E_c/\Delta E_g$(QW)	0.32	
带内豫驰时间	0.1	ps
电子捕获时间		ps
空穴捕获时间	1.2	ps
俄歇系数	1.5E－30(at RT)	$cm^6 s^{-1}$
禁带重整系数	－0.00225e－05	eV
自由载流子吸收截面	3E－18(n);7E－18(p)	cm^2
BPM 参数		
计算区域	2000×400	μm^2
横向步长	0.1～0.4	μm
纵向步长	1～2	μm

用空间辐射法（对镀膜内的非导引光）和有限差分光束传播法（对半导体内的导引光）相结合，可以计算端面反射[85]。这些计算表明，对我们所研究的结构只需要简单的反射系数即可，只有仿真开始的时候才需要校精确的计算。我们还可以看到，使用 Pade（1，1）大角度格式[86]（参考第4章）可以满足研究光锥中光束传播的要求。光束扰波片的分析，也可以用 Marjoulis[73] 中的简化法，将光束扰波片相接的区域处理为全吸收。

对比试验和两步拟合的仿真，首先，我们将相同结构的大面积的激光器阈值电流和斜线效率测量结果，与文献［82］中激光器仿真做比较。拟合参数为束缚区的阱密度和内部散射损耗。然后，我们对比锥形激光器的束腰计算值和实验测得的远场图像。拟合参数为载流子引起折射率微扰的比例常数，以及载流子密度。本章中分析的延晶结构有 -2.7×10^{-11} ［$cm^{3/2}$］ 的良好晶格匹配。仿真所用的延晶结构相同，而激光器集合参数（锥角、腔场）不同。

在图 8.26 和图 8.27 中，我们用准 3D 锥形激光器模型，对高功率锥形激光器进行了两个仿真。仿真结果显示，模型可以预测各种电流值偏置时的光束参数。

图 8.26 对比了实验和数值计算得到的光电流特性、M^2、虚拟光源的中心瓣功率以及像差。实验和仿真的光电流特性有很好的拟合度，其阈值电流和斜线效率相同。同样，实验和仿真的得到的虚拟光源的中心瓣功率以及散射也有很好的拟合度。

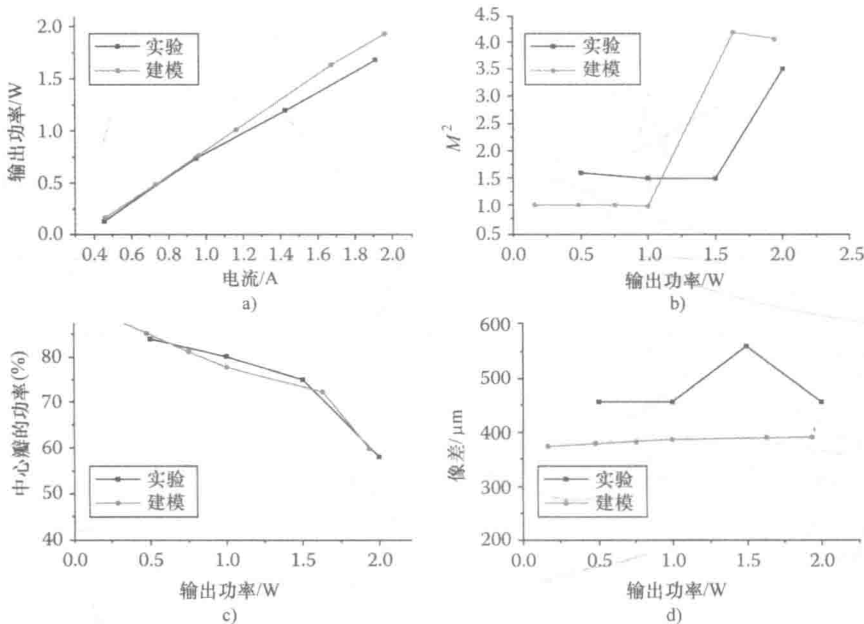


图 8.26 光电流特性、电流－电压关系，与光束发散角、M^2、虚拟光源的中心瓣功率、像差、光束束腰与光功率之间的关系

（$L=2mm$，$L_{RW}=0.75mm$，$W_{RW}=3\mu m$，$W_o=90.3\mu m$，$R_{RW}=95\%$，$R_o=1\%$，$\Delta n_{eff}=0.008$）

图 8.27 对比了实验和数值计算得到的给定输出功率近场图案。近场图案拟合得非常好。实验和数值结果都显示了侧瓣的存在，以及沿着近场图案梯度方向上高输出功率时的光丝。

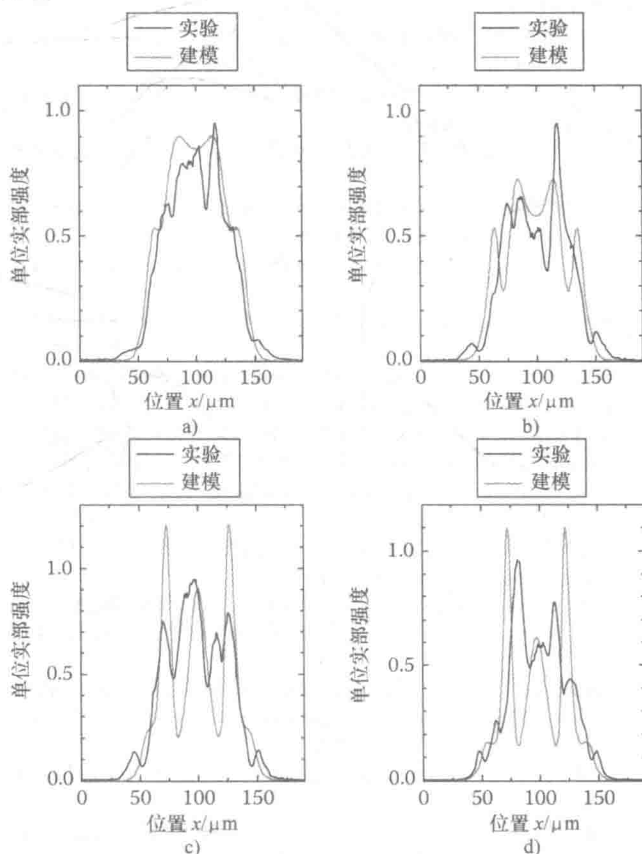


图 8.27　近场分布，与图 8.26 的几何尺寸相同

（$R_{RW}=95\%$，$R_o=1\%$，a）$P=0.5W$，b）$P=1W$，c）$P=1.5W$，d）$P=2W$）

参考文献

1. Numai, T., *Laser Diodes and their Applications to Communications and Information Processing*. 2010, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., IEEE Press.
2. Numai, T., *Fundamentals of Semiconductor Lasers*. 2004, New York: Springer-Verlag.
3. Chow, W.W. and S. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals: Physics of the Gain Materials*. 1999, Berlin: Springer.
4. Vasil'ev, P., *Ultrafast Diode Lasers: Fundamentals and Applications*. 1995, Boston: Artech House.
5. Kawaguchi, H., *Bistabilities and Nonlinearities in Laser Diodes*. 1994, Boston: Artech House.
6. Agrawal, G.P. and N.K. Dutta, *Semiconductor Lasers*. 1993, New York: Van Nostrand Reinhold.
7. Zory, P.S., *Quantum Well Lasers*. 1993, Boston: Academic Press.
8. Thompson, G.H.B., *Physics of Semiconductor Laser Devices*. 1980, Chichester: Wiley.

9. Carroll, J.E., *Distributed Feedback Semiconductor Lasers*. 1998, London: SPIE Press.
10. Ghafouri-Shiraz, H., *The Principles of Semiconductor Laser Diodes and Amplifiers*. 2004, London: Imperial College Press.
11. Ebeling, K.J., *Integrated Optoelectronics*. 1992, Berlin: Springer-Verlag.
12. Coldren, L.A. and S.W. Corzine, Microwave and Optical Engineering. *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*. ed. K. Chang. 1995, New York: Wiley.
13. Piprek, J., *Semiconductor Optoelectronic Devices Intorduction to Physics and Simulation*. 2003, San Diego: Academic Press.
14. Piprek, J., ed., *Optoelectronic Devices, Advanced Simulation and Analysis*. 2010, New York: Springer.
15. Piprek, J., ed., *Nitride Semiconductor Devices: Principles and Simulation*. 2007, Weinheim: Wiley VCH Verlag GmbH& Co. KGaA.
16. Coldren, L.A. and S.W. Corzine, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*. 1995, New York: Wiley.
17. Petermann, K., *Laser Diode Modulation and Noise*. 1991, London: Kluwer Academic Publishers.
18. Kawaguchi, H., Bistable laser diodes and their applications: State of the art. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1997. 3(5): p. 1254–1270.
19. Olshansky, R., et al., Frequency-response of 1.3-mi InGaAsP high-speed semiconductor-lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1987. 23(9): p. 1410–1418.
20. Harder, C., et al., Noise equivalent-circuit of a semiconductor-laser diode. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1982. 18(3): p. 333–337.
21. Marcuse, D. and T.P. Lee, Rate-equation model of a coupled-cavity laser. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1984. 20(2): p. 166–176.
22. Kurtz, R.M., et al., Mutual injection locking: A new architecture for high-power solid-state laser arrays. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2005. 11(3): p. 578–586.
23. Khurgin, J.B., I. Vurgaftman, and J.R. Meyer, Analysis of phase locking in diffraction-coupled arrays of semiconductor lasers with gain/index coupling. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2005. 41(8): p. 1065–1074.
24. Marcuse, D., Classical derivation of the laser rate-equation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1983. 19(8): p. 1228–1231.
25. Hakki, B.W. and T.L. Paoli, Gain spectra in GaAs double-heterostructure injection lasers. *Journal of Applied Physics*, 1975. 46(3): p. 1299–1306.
26. Cassidy, D.T., Technique for measurement of the gain spectra of semiconductor diode-lasers. *Journal of Applied Physics*, 1984. 56(11): p. 3096–3099.
27. Bir, G.L. and G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*. 1974, New York: Wiley.
28. Collatz, L., *The Numerical Treatment of Differential Equations*. 1960, Berlin: Springer-Verlag.
29. Alam, M.A., et al., Simulation of semiconductor quantum well lasers. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2000. 47(10): p. 1917–1925.
30. Lim, J.J., et al., Simulation of double quantum well GaInNAs laser diodes. *IET Optoelectronics*, 2007. 1(6): p. 259–265.
31. Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., *Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing*. 2002, Cambridge: Cambridge University Press.
32. Lee, T.P., et al., Short-cavity InGaAsP injection-lasers—dependence of mode spectra and single-longitudinal-mode power on cavity length. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1982. 18(7): p. 1101–1113.

33. LeVeque, R.J. and Z. Li, The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 1994. 31(4): p. 1019–1044.
34. Lang, R.J., J. Salzman, and A. Yariv, Modal-analysis of semiconductor-lasers with nonplanar mirrors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1986. 22(3): p. 463–470.
35. Twu, Y., et al., Mode characteristics of phase-locked semiconductor-laser arrays at and above threshold. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1987. 23(6): p. 788–803.
36. Tee, C.W., et al., Transient response of ARROW VCSELs. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2005. 41(2): p. 140–147.
37. Izhaky, N. and A.A. Hardy, Analysis of DBR lasers and MOPA with saturable absorption gratings. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1997. 33(7): p. 1149–1155.
38. Ryvkin, B.S. and E.A. Avrutin, Spatial hole burning in high-power edge-emitting lasers: A simple analytical model and the effect on laser performance. *Journal of Applied Physics*, 2011. 109(4).
39. Marcuse, D., Computer-model of an injection-laser amplifier. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1983. 19(1): p. 63–73.
40. Agrawal, G.P. and N.A. Olsson, Self-phase modulation and spectral broadening of optical pulses in semiconductor-laser amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1989. 25(11): p. 2297–2306.
41. Agrawal, G.P., Population pulsations and nondegenerate 4-wave mixing in semiconductor-lasers and amplifiers. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 1988. 5(1): p. 147–159.
42. Tang, J.M. and K.A. Shore, Carrier diffusion and depletion effects on multiwave mixing in semiconductor lasers. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1997. 3(5): p. 1280–1286.
43. Koltchanov, I., et al., Gain dispersion and saturation effects in four-wave mixing in semiconductor laser amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1996. 32(4): p. 712–720.
44. Connelly, M.J., *Semiconductor Optical Amplifiers*. 2004, London: Kluver Academic Publishers.
45. Schell, M., et al., Fundamental limits of sub-ps pulse generation by active-mode locking of semiconductor-lasers—The spectral gain width and the facet reflectivities. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(6): p. 1661–1668.
46. Yang, W. and A. Gopinath, Study of passive-mode locking of semiconductor-lasers using time-domain modeling. *Applied Physics Letters*, 1993. 63(20): p. 2717–2719.
47. Jones, D.J., et al., Dynamics of monolithic passively mode-locked semiconductor-lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1995. 31(6): p. 1051–1058.
48. Wong, Y.L. and J.E. Carroll, A traveling-wave rate-equation analysis for semiconductor-lasers. *Solid-State Electronics*, 1987. 30(1): p. 13–19.
49. Chi, J.W.D., L. Chao, and M.K. Rao, Time-domain large-signal investigation on nonlinear interactions between an optical pulse and semiconductor waveguides. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2001. 37(10): p. 1329–1336.
50. Vankwikelberge, P., G. Morthier, and R. Baets, CLADISS - a longitudinal multimode model for the analysis of the static, dynamic, and stochastic-behavior of diode-lasers with distributed feedback. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1990. 26(10): p. 1728–1741.
51. Zhang, L.M., et al., Dynamic analysis of radiation and side-mode suppression in a 2nd-order dfb laser using time-domain large-signal traveling-wave model. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1994. 30(6): p. 1389–1395.
52. Vladimirov, A.G., D. Turaev, and G. Kozyreff, Delay differential equations for mode-locked semiconductor lasers. *Optics Letters*, 2004. 29(11): p. 1221–1223.

53. Rossetti, M., P. Bardella, and I. Montrosset, Modeling Passive Mode-Locking in Quantum Dot Lasers: A Comparison Between a Finite-Difference Traveling-Wave Model and a Delayed Differential Equation Approach. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2011. 47(5): p. 569–576.
54. Javaloyes, J. and S. Balle, Multimode dynamics in bidirectional laser cavities by folding space into time delay. *Optics Express*, 2012. 20(8): p. 8496–8502.
55. Sujecki, S., et al., Nonlinear properties of tapered laser cavities. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2003. 9(3): p. 823–834.
56. Sujecki, S., Stability of steady-state high-power semiconductor laser models. *Journal of Optical Society of America B*, 2007. 24(4): p. 1053–1060.
57. Grupen, M. and K. Hess, Simulation of carrier transport and nonlinearities in quantum-well laser diodes. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1998. 34(1): p. 120–140.
58. Keating, T., et al., Temperature dependence of electrical and optical modulation responses of quantum-well lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999. 35(10): p. 1526–1534.
59. Hadley, G.R., et al., Comprehensive numerical modeling of vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1996. 32(4): p. 607–616.
60. Gustavsson, J.S., et al., A comprehensive model for the modal dynamics of vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2002. 38(2): p. 203–212.
61. Wenzel, H. and H.J. Wunsche, The effective frequency method in the analysis of vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1997. 33(7): p. 1156–1162.
62. Streiff, M., et al., A comprehensive VCSEL device simulator. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2003. 9(3): p. 879–891.
63. Conradi, O., S. Helfert, and R. Pregla, Comprehensive modeling of vertical-cavity laser-diodes by the method of lines. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2001. 37(7): p. 928–935.
64. Debernardi, P., HOT-VELM: A comprehensive and efficient code for fully vectorial and 3-D hot-cavity VCSEL simulation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2009. 45(8): p. 969–982.
65. Jungo, M.X., D. Erni, and W. Bachtold, VISTAS: A comprehensive system-oriented spatiotemporal VCSEL model. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2003. 9(3): p. 939–948.
66. Lee, T.W., et al., Modal characteristics of ARROW-type vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2001. 13(8): p. 770–772.
67. Grupen, M., et al., Coupling the electronic and optical problems in semiconductor quantum well laser simulations. *SPIE Proceedings*, 1994. 2146: p. 133–147.
68. Champagne, Y., S. Mailhot, and N. McCarthy, Numerical procedure for the lateral-mode analysis of broad-area semiconductor-lasers with an external-cavity. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1995. 31(5): p. 795–810.
69. Wolff, S., et al., Fourier-optical transverse mode selection in external-cavity broad-area lasers: Experimental and numerical results. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2003. 39(3): p. 448–458.
70. Lang, R.J., A.G. Larsson, and J.G. Cody, Lateral-modes of broad area semiconductor-lasers—Theory and experiment. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1991. 27(3): p. 312–320.
71. Sujecki, S., et al., Optical properties of tapered laser cavities. *IEE Proceeding Journal*, 2003. 150(3): p. 246–252.
72. Williams, K.A., et al., Design of High—Brightness Tapered Laser Arrays. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1999. 5(3): p. 822–831.

73. Mariojouls, S., et al., Modelling of the Performance of High-Brightness Tapered Lasers. *SPIE Proceedings*, 2000. 3944: p. 395–406.
74. Ramanujan, S. and H.G. Winful, Spontaneous emission induced filamentation in flared amplifiers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1996. 32(5): p. 784–789.
75. Gering, E., O. Hess, and R. Wallenstein, Modelling of the Performance of High-Power diode amplifier systems with on opto-thermal microscopic spatio-temporal theory. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1999. 35(3): p. 320–331.
76. Yu, S.F., A quasi-three-dimensional large-signal dynamic model of distributed feedback lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1996. 32(3): p. 424–432.
77. Ning, C.Z., et al., A first-principles fully space-time resolved model of a semiconductor laser. *Quantum and Semiclassical Optics*, 1997. 9(5): p. 681–691.
78. Williams, K.A., et al., Design of high-brightness tapered laser arrays. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1999. 5(3): p. 822–831.
79. Hess, O., S.W. Koch, and J.V. Moloney, Filamentation and beam-propagation in broad-area semiconductor-lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1995. 31(1): p. 35–43.
80. Borruel, L., et al., Quasi-3-D simulation of high-brightness tapered lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2004. 40(5): p. 463–472.
81. Borruel, L., et al., A Selfconsistent Electrical, Thermal and Optical Model of High Brightness Tapered Lasers. *SPIE Proceedings*, 2002. 4646: p. 355–366.
82. Arias, J., et al., One-Dimensional Simulation of High Power Laser Diode Structures. In NUSOD. 2002. Zurich. p. 8–9.
83. Wenzel, H., G. Erbert, and P.M. Enders, Improved theory of the refractive-index change in quantum-well lasers. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1999. 5(3): p. 637–642.
84. Wykes, J.G., et al., Convergence behaviour of coupled electromagnetic/thermal/electronic high power laser models. In *IEE Computation in Electromagnetics Conference*. 2002. Bournemouth, UK. p. 91–92.
85. Benson, T.M., P. Sewell, and A. Vukovic. Interfacing the Finite Difference Beam Propagation Method with Fast Semi-Analytic Techniques. In *OSA Integrated Photonics Research Symposium*. Quebec, Canada. 2000. p. 48–50.
86. Anada, T., et al., Very-wide-angle beam propagation methods for integrated optical circuits. *IEICE Transactions on Electronics*, 1999. E82-C(7): p. 1154–1158.
87. Borruel, L., et al., Quasi 3D simulation of high brightness tapered lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2004. 40(5): p. 463–472.
88. Borruel, L., et al., Modelling of patterned contacts in tapered lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2004. 40(10): p. 1384–1388.
89. Borruel, L., et al., Clarinet laser: Semiconductor laser design for high-brightness applications. *Applied Physics Letters*, 2005. 87(10): p. 101104.
90. Lim, J.J., et al., Design and simulation of next-generation high-power, high-brightness laser diodes. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2009. 15(3): p. 993–1008.

第9章　光纤中的光脉冲传播

理解光传输介质中光脉冲的演进，对设计光通信链路[1,2]、超连续谱光源[3]和自脉冲模式锁定激光器[4]至关重要。在本章中，我们将讨论数值方法对光纤中光脉冲的传播进行建模。特别是，我们将详细阐述分步傅里叶法（Split - step Fourier Method，SSFM）。这种相对简单的算法广泛用于研究光纤中的脉冲传播。我们首先在“引言”一节中进行一个简短的介绍，然后在“光纤内的光脉冲传播”中推导非线性薛定谔方程（NSE）。在9.3节中，我们将讨论SSFM的应用，求解NSE，并总结该数值方法如何应用到超连续光源的仿真中。

9.1　引言

当分析光的非线性现象时，需要清楚的区分定量描述光束演进的数学模型，和解释特定非线性现象的物理原因的物理模型。前一种模型给出描述电极化向量和电场向量关系的表达式[5]：

$$\vec{P}=\varepsilon_0(\chi^{(1)}\vec{E}+\chi^{(2)}:\vec{E}\vec{E}+\chi^{(3)}\ \vdots\ \vec{E}\,\vec{E}\vec{E}+,\cdots)\tag{9.1}$$

方程（9.1）是时移不变系统的电极化向量和电场向量关系的非常一般的形式。$\chi^{(n)}$为电磁化系数，它与时间有关，也与电场向量和空间变量有关。方程（9.1）的第一项极化向量和电场的线性关系。第二项时Pockels效应，第三项是Kerr效应。需要注意的是，方程（9.1）只给出了物理现象的数学描述，而并不能解释物理原因。非线性光学现象的后面一些性质，通常既需要量子电动力学，也需要电动力学理论实验和理论分析相结合的深度解析和灵光乍现的思考才能诠释。如，从数学角度来看，拉曼增益效应是三阶非线性系数的虚部，而从物理本质上解释，它是泵浦光和信号光在光声子相互作用下的结果。高级非线性光学现象讨论，可参考标准教科书[5-8]。在本章中，我们用非线性现象的数学描述，研究光波导中的光脉冲传播。我们将讨论研究光纤中光脉冲传播的建模方法。特别是，我们将使用SSFM，对研究光纤中光脉冲传播开发一个数值建模工具。

9.2　光纤中的光脉冲传播

在一般的光通信硅玻璃光纤中，由于光脉冲的脉冲电磁场会与介质发生相互作用，导致光脉冲的形状会在传播中发生变化。这种变化可能是我们想要的，例如设计超连续光源时；也可能是我们不想要的，例如用光纤作为传输介质长距离光通信

系统。

下面，我们将推导描述光波导中光脉冲演进的方程。众多教科书[1,2,9]中都可以找到推导过程。我们在这里的推导过程与前面所述的材料一致。我们可以从麦克斯韦方程起步，推导脉冲波包演进的方程：

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{9.2a}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \tag{9.2b}$$

它的唯一解需要满足如下边界条件：

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0 \tag{9.3a}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \tag{9.3b}$$

以及材料方程：

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \tag{9.4a}$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \tag{9.4b}$$

极化向量分为两个部分：

$$\vec{P} = \vec{P}_{\mathrm{L}} + \vec{P}_{\mathrm{NL}} \tag{9.5}$$

线性部分为

$$\vec{P}_{\mathrm{L}}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \chi^{(1)}(\vec{r},\tau)\vec{E}(\vec{r},t-\tau)\mathrm{d}\tau \tag{9.6a}$$

而非线性部分为

$$\vec{P}_{\mathrm{NL}}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \chi^{(3)}(\vec{r},\tau_1,\tau_2,\tau_3) \vdots \vec{E}(\vec{r},t-\tau_1)\vec{E}(\vec{r},t-\tau_2)\vec{E}(\vec{r},t-\tau_3)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3 \tag{9.6b}$$

式中，$\chi^{(1)}$为二级张量，$\chi^{(3)}$为四级张量。非线性部分只有三阶非线性，可参考方程（9.1）。

计算方程（9.2a）的旋度，并将方程（9.2b）代入右侧，可得到

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c_0^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} \tag{9.7}$$

式中，$c_0 = 1/\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}$。因为$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E}$，所以方程（9.7）可以变形为

$$-\nabla^2 \vec{E} + \nabla(\nabla \vec{E}) = -\frac{1}{c_0^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} \tag{9.8}$$

我们假设波导中光脉冲沿着 z 方向传播（参见图 3.1），所以$\chi^{(1)}$与 z 无关。我

们假设$\chi^{(3)}$的浓度到$\chi^{(1)}$浓度可以忽略。所以可以认为$\chi^{(3)}$只与z有关。这个假设对研究光脉冲在光纤中的传播基本正确（参考文献［1］中的4.7节），不过忽略了$\chi^{(3)}$横向分布造成的光束聚焦，所以会造成光弧波[10]。我们还假设电场分布只包含x方向的横向分量，并忽略偏振耦合。对$\chi^{(3)}$，我们还假设介质有瞬时的非线性响应[1,2]。所以，我们可以将方程（9.6）变形为

$$P_{\mathrm{Lx}}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},\tau)\mathrm{d}\tau \tag{9.9a}$$

$$P_{\mathrm{NLx}}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \chi_{\mathrm{xxxx}}^{(3)}(z) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},t) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},t) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},t) \tag{9.9b}$$

参考文献［1］的4.3节，在方程（9.9）中，$\chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}$和$\chi_{\mathrm{xxxx}}^{(3)}$是电场和极化向量相对应的极化张量元素，它们是标量。而且，由方程（9.4），我们可以得到如下方程：

$$\frac{\partial E_{\mathrm{x}}(\vec{r},\tau)}{\partial x} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+\chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau)} \frac{\partial \chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},\tau)}{\partial x}\mathrm{d}\tau \tag{9.10}$$

将9.9、9.10和9.8联立，可以得到电场向量的x分量：

$$\frac{\partial^2 E_{\mathrm{x}}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_{\mathrm{x}}}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+\chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau)} \frac{\partial \chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau) E_{\mathrm{x}}(\vec{r},\tau)}{\partial x}\mathrm{d}\tau + \frac{\partial^2 E_{\mathrm{x}}}{\partial z^2} = \mu_0\varepsilon_0 \frac{\partial^2 E_{\mathrm{x}}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial^2 P_{\mathrm{x}}}{\partial t^2} \tag{9.11}$$

我们不对方程（9.11）应用$\nabla \cdot \vec{E}=0$的假设[1,2,9]。极化近似比标量近似适用的波导类型更广。现在我们将解表示为如下形式：

$$E_{\mathrm{x}}(\vec{r},t) = \frac{1}{2}(\overline{E}_{\mathrm{x}}(\vec{r},t)\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t) + \overline{E}_{\mathrm{x}}^{*}(\vec{r},t)\exp(\mathrm{j}\omega_0 t)) \tag{9.12}$$

文献［2］的各版本中都习惯用方程（9.12）的形式。而在本书的其他章节中，都没有这个形式。这是因为我们不希望后面更为详细推导，对读者造成混乱。读者需要知道，当前的推导只是一个化简后的形式[2]。

将方程（9.12）代入方程（9.11）和方程（9.9），可以得到如下$\overline{E}_{\mathrm{x}}(\vec{r},t)$的方程：

$$\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t)\left(\frac{\partial^2 \overline{E}_{\mathrm{x}}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{E}_{\mathrm{x}}}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+\chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau)} \frac{\partial \chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(x,y,t-\tau)\overline{E}_{\mathrm{x}}(\vec{r},\tau)}{\partial x}\mathrm{d}\tau + \frac{\partial^2 \overline{E}_{\mathrm{x}}}{\partial z^2}\right)$$
$$= \mu_0\varepsilon_0\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}[\overline{E}_{\mathrm{x}}\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t)] + \frac{\partial^2}{\partial t^2}\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{\mathrm{xx}}^{(1)}(t-\tau)\overline{E}_{\mathrm{x}}\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t)\mathrm{d}\tau + \chi_{\mathrm{xxxx}}^{(3)}\frac{3}{4}\frac{\partial^2}{\partial t^2}[|\overline{E}_{\mathrm{x}}|^2\overline{E}_{\mathrm{x}}\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t)]\right) \tag{9.13}$$

方程（9.13）右侧的最后一项中，我们只考虑$\exp(-\mathrm{j}\omega_0 t)$相位因子的贡献。进行傅里叶变换后，可得

$$\tilde{\chi}_{xx}^{(1)}(x,y,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\chi_{xx}^{(1)}(x,y,t)\exp(j\omega t)\,dt \tag{9.14a}$$

$$\tilde{E}_x(\vec{r},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\bar{E}_x(\vec{r},t)\exp(j\omega t)\,dt \tag{9.14b}$$

方程（9.13）隐含了如下方程：

$$\frac{\partial^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon_r}\frac{\partial(\varepsilon_r\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0))}{\partial x}\right)+\frac{\partial^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)}{\partial z^2}$$

$$=-\mu_0\varepsilon_0\varepsilon_r\omega^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)-\mu_0\varepsilon_0\chi_{xxxx}^{(3)}\frac{3}{4}\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}|\bar{E}_x|^2\bar{E}_x\exp(-j\omega_0 t)\exp(j\omega t)\,dt \tag{9.15}$$

式中，$\varepsilon_r=1+\chi_{xx}^{(1)}$（$x$，$y$，$\omega$）。现在我们从 $\tilde{E}_x$（$\vec{r}$，$\omega-\omega_0$）中提取随 z 快速变化的相位因子：

$$\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)=\tilde{E}'_x(x,y,\omega)\exp(j\beta_0 z)\tilde{B}(z,\omega-\omega_0) \tag{9.16}$$

在方程（9.16）中，我们假设横向场分布可以表示为光波导基模的横向分布，而 β_0 对应了角频率为 ω_0 时的传播常数。为了确保表达式（9.16）的单值性，我们引入如下条件：

$$\iint_S|\tilde{E}_x(x,y,\omega_0)|^2\,dx\,dy=1$$

式中，S 表示了横平面。将方程（9.16）代入方程（9.15），并和方程（3.14a）联立，用缓变（w. r. t z）波包近似 $\tilde{B}(z,\ \omega-\omega_0)$，可得

$$\tilde{E}'_x\exp(j\beta_0 z)\left((\beta^2-\beta_0^2)\tilde{B}+2j\beta_0\frac{\partial\tilde{B}}{\partial z}\right)$$

$$=-\mu_0\varepsilon_0\chi_{xxxx}^{(3)}\frac{3}{4}\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}|\bar{E}_x|^2\bar{E}_x\exp(-j\omega_0 t)\exp(j\omega t)\,dt \tag{9.17}$$

式中，ω 基模传播常数与 β 的关系，可由：

$$\frac{\partial^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\varepsilon_r}\frac{\partial(\varepsilon_r\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0))}{\partial x}\right)+\mu_0\varepsilon_0\varepsilon_r\omega^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)$$

$$=\beta^2\tilde{E}_x(\vec{r},\omega-\omega_0)$$

解出。这个方程相当于在忽略非线性极化微扰的情况下，对基模求解方程（3.14a）。现在，我们用：

$$\beta^2-\beta_0^2=(\beta+\beta_0)(\beta-\beta_0)=2\beta_0(\beta-\beta_0) \tag{9.18}$$

和泰勒级数对 β 做近似和展开：

$$\beta-\beta_0=\frac{\partial\beta}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=\omega_0}(\omega-\omega_0)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2\beta}{\partial\omega^2}\bigg|_{\omega=\omega_0}(\omega-\omega_0)^2+\cdots \tag{9.19}$$

将方程（9.18）代入方程（9.17），并在右侧结合方程（9.19）展开，我们用 ω_0 近似 ω：

$$\widetilde{E}'_{x}\exp(j\beta_0 z)\left(2\beta_0\left(\beta_1(\omega-\omega_0)+\frac{1}{2}\beta_2(\omega-\omega_0)^2+\cdots\right)\widetilde{B}+2j\beta_0\frac{\partial\widetilde{B}}{\partial z}\right)$$
$$=-\mu_0\varepsilon_0\chi^{(3)}_{xxxx}\frac{3}{4}\omega_0^2\int_{-\infty}^{\infty}|\overline{E}_x|^2\overline{E}_x\exp(-j\omega_0 t)\exp(j\omega t)\,dt \tag{9.20}$$

其中 $\beta_1=\frac{\partial\beta}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=\omega_0}$；$\beta_2=\frac{\partial^2\beta}{\partial\omega^2}\bigg|_{\omega=\omega_0}$，

由方程（9.20），在时域我们可得

$$\widetilde{E}'_{x}\exp(j\beta_0 z)\left(2\beta_0\left(j\beta_1\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{2}\beta_2\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\cdots\right)B+2j\beta_0\frac{\partial B}{\partial z}\right)=-\mu_0\varepsilon_0\chi^{(3)}_{xxxx}\frac{3}{4}\omega_0^2|\overline{E}_x|^2\overline{E}_x \tag{9.21}$$

其中

$$B(z,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\widetilde{B}(z,\omega)\exp(-j\omega t)\,df \tag{9.22}$$

由方程（9.22）以及假设 $\widetilde{E}'_{x}(x,y,\omega)=\widetilde{E}'_{x}(x,y,\omega_0)$，在时域，方程（9.16）可表示为

$$\overline{E}_x(\vec{r},t)=\widetilde{E}'_{x}(x,y,\omega_0)\exp(j\beta_0 z)B(z,t) \tag{9.23}$$

将方程（9.23）代入方程（9.21），可得

$$\widetilde{E}'_{x}\exp(j\beta_0 z)\left(2\beta_0\left(j\beta_1\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{2}\beta_2\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\cdots\right)B+2j\beta_0\frac{\partial B}{\partial z}\right)$$
$$=-\mu_0\varepsilon_0\chi^{(3)}_{xxxx}\frac{3}{4}\omega_0^2|\widetilde{E}'_{x}|^2\widetilde{E}'_{x}|B|^2B\exp(j\beta_0 z) \tag{9.24}$$

我们将方程（9.24）的两侧同时乘以 $\widetilde{E}'^{*}_{x}$，并在横平面 S 对方程（9.24）两侧求积分，可得：

$$2\beta_0\left(j\beta_1\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{2}\beta_2\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\cdots\right)B+2j\beta_0\frac{\partial B}{\partial z}=-\mu_0\varepsilon_0\chi^{(3)}_{xxxx}\frac{3}{4}\omega_0^2\Gamma|B|^2B \tag{9.25}$$

其中 Γ 为

$$\Gamma=\frac{\iint_S|\widetilde{E}_x(x,y,\omega_0)|^4\,dx\,dy}{\iint_S|\widetilde{E}_x(x,y,\omega_0)|^2\,dx\,dy} \tag{9.26}$$

现在方程（9.25）可以表示为

$$\left(\beta_1 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{j}{2}\beta_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \cdots\right)B + \frac{\partial B}{\partial z} = j\gamma' |B|^2 B \tag{9.27}$$

其中：

$$\gamma' = \frac{3}{8}\frac{\mu_0\varepsilon_0\omega_0^2}{\beta_0}\chi_{xxxx}^{(3)}(z) = \Gamma k_0 n'_2, n'_2 = \frac{3}{8n}\chi_{xxxx}^{(3)}(z), \text{and } n(\text{core}) = \sqrt{1 + \chi_{xx}^{(1)}(\text{core})}$$

式中$\chi_{xx}^{(1)}$（core）为$\chi_{xx}^{(1)}$在光波导芯区的值。在方程（9.27）中，B 的单位为 V，n'_2 的单位和$\chi_{xxxx}^{(2)}$相同，为［m^2/V^2］。所以 γ'的单位为［$1/(mV^2)$］。而 n'_2 为 Kerr 效应系数，它由如下方程定义：

$$n(|E|) = n + n'_2 |E|^2 \tag{9.28}$$

我们习惯定义 n_2 的单位为［m^2/W］：

$$n(I) = n + n_2 I \tag{9.29}$$

式中，I 为光强度，单位为［W/m^2］。由波阻抗的定义 $Z = \sqrt{\mu_0/(\varepsilon_0\varepsilon_w)}$，以及 $I = |E|^2/Z$ 的关系（参阅文献［11］的第 19 章和文献［2］的第 2 张，以及“光纤”一节），可以将方程（9.28）变形为

$$n(|E|) = n + n_2 Z I \tag{9.30}$$

现在，我们可以将方程（9.27）改写为

$$\left(\beta_1 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{j}{2}\beta_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \cdots\right)A + \frac{\partial A}{\partial z} = j\gamma |A|^2 A \tag{9.31}$$

式中，$A = \frac{B}{\sqrt{Z}}$，$\gamma = \Gamma k_0 n_2 = \gamma' Z$，$n_2 = Z\frac{3}{8n}\chi_{xxxx}^{(3)}$，（$z$）$= n'_2 Z$，$|A|^2$ 的单位为［W］，Γ 和 γ 的单位分别为［$1/m^2$］和［$m^{-1}W^{-1}$］。为了完整性器件，方程（9.23）中 $\widetilde{E}'_x$（x，y，ω_0）的单位为［1/m］。

最后，还有一个问题是折射率值 n 的选择。如果基模在弱导引阶梯折射率光纤中传播，则根据前文所述，以及第 3 章的讨论（有效折射率法一节），选择基模在频率 ω_0 的有效折射率最为适合。

引入变量代换：$z = z$ 以及 $T = t - z/v_g = t - \beta_1 z$，取泰勒展开式到三阶项，可得：

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \left(-\frac{j}{2}\beta_2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} + \frac{1}{6}\beta_3 \frac{\partial^3}{\partial T^3}\right)A + (j\gamma |A|^2)A \tag{9.32}$$

方程（9.32）可以用于光通信系统光纤中的光脉冲传播研究。在下一节中，我们将详细讨论应用广泛的分步傅里叶法（SSFM）对方程（9.32）进行求解。其他求解方程（9.32）最新的数值方法概览可参阅文献［2］。如果只保留到二阶项的泰勒展开式，则方程（9.32）变为 NSE。

9.3　分步傅里叶法

方程（9.32）可以变形为如下形式：

$$\frac{\partial A}{\partial z} = (D+N)A \tag{9.33}$$

式中，算子 D 和 N 为

$$D = -\frac{\mathrm{j}}{2}\beta_2\frac{\partial^2}{\partial T^2}+\frac{1}{6}\beta_3\frac{\partial^3}{\partial T^3};\ N=\mathrm{j}\gamma|A|^2 \tag{9.34}$$

现在，我们对 $z=z_0$ 给定的值，求 $A(z)$ 的表达式，可得

$$A(z_0+\Delta z)=A(z_0)+\left.\frac{\mathrm{d}A(z)}{\mathrm{d}z}\right|_{z0}\Delta z+\left.\frac{\mathrm{d}^2A(z)}{\mathrm{d}z^2}\right|_{z0}\Delta z^2+\cdots \tag{9.35}$$

由式（9.35），我们可以看到，算子 d/dz 作用于 A，相当于算子（$D+N$）作用与 A。所以，式（9.35）可以改写成如下形式：

$$A(z_0+\Delta z)=A(z_0)+(D+N)A(z_0)\Delta z+(D+N)^2A(z_0)\Delta z\Delta z^2+\cdots \tag{9.36}$$

它和指数函数的展开式形式相同。所以，可以写成如下形式：

$$A(z_0+\Delta z)=\mathrm{e}^{(D+N)\Delta z}A(z_0) \tag{9.37}$$

式（9.36）是指数算子的定义。

如果 $A(z_0)$ 已知，方程（9.37）可以计算在位置 $z_0+\Delta z$ 处 A 的时间相关性。所以，如果已知在点 z_0 处 A 的初始时间相关性已知，则可以通过反复应用此方程，计算出在沿着光纤的任意点上，波包函数 A 的时间相关性。唯一还未解决的问题是，如何计算指数函数作用于波包函数的结果。显然，最直接的方法是使用式（9.36）的定义计算。不过，该方法需要对微分算子 D 做特殊测量。为了绕过这个问题，我们使用分步傅里叶法（SSFM）。SSFM 的第一步是将指数算子分解为

$$A(z_0+\Delta z)=\mathrm{e}^{N\Delta z}\mathrm{e}^{D\Delta z}A(z_0)$$

如果 $N\Delta z$ 和 $D\Delta z$ 是可交换的，则这个分解过程不会带来任何误差。但是，很遗憾它们不是可交换的。不过，如果 Δz 很小，则造成的误差可忽略不计，所以算子是可以分离的。而且，如果将算子分离成如下对称形式，则误差还可以进一步减小：

$$A(z_0+\Delta z)=\mathrm{e}^{D\frac{\Delta z}{2}}\mathrm{e}^{N\Delta z}\mathrm{e}^{D\frac{\Delta z}{2}}A(z_0) \tag{9.38}$$

最后一个有助于算法效率提高的要点是，D 算子在傅里叶空间是对角算子，换句话说，它作用于函数，相当于是乘以一个常数（或乘以一个函数）。对下面方程两侧做傅里叶变换（对时域）：

$$\frac{\partial A(z,T)}{\partial z}=DA=\left(-\frac{\mathrm{j}}{2}\beta_2\frac{\partial^2}{\partial T^2}+\frac{1}{6}\beta_3\frac{\partial^3}{\partial T^3}\right)A(z,T) \tag{9.39}$$

就可以直接看到这一点：

$$\frac{\partial A(z,\omega)}{\partial z}=\mathrm{j}\left(\frac{1}{2}\beta_2\omega^2-\frac{1}{6}\beta_3\omega^3\right)A(z,\omega) \tag{9.40}$$

算法 9.1　光脉冲在光纤中传播的 SSFM

1. 开始；
2. 设置 γ、β_1、β_2 和 Δz 的值；
3. 为 2^N 选择等距离采样点的 N；

4. 初始化：$z=0$ 和 $A(x, z=0) = A_0(x)$；
5. 计算 $A(x, z)$：$B(x, z) = \Im[A(x, z)]$ 的 FFT；
6. 计算 $B\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) = B(x, z)\, \mathrm{e}^{\frac{1}{2}D\Delta z}$；
7. 计算反 FFT：$B\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right)$：$A\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) = \Im^{-1}\left[B\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right)\right]$；
8. 计算 $C\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) = A\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) \mathrm{e}^{N\Delta z}$
9. 计算 $C\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right)$：$D\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) = \Im\left[C\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right)\right]$ 的 FFT；
10. 计算 $D(x, z+\Delta z) = D\left(x, z+\frac{1}{2}\Delta z\right) \mathrm{e}^{\frac{1}{2}D\Delta z}$；
11. 计算反 FFT：$D(x, z+\Delta z)$：$A(x, z+\Delta z) = \Im^{-1}[D(x, z+\Delta z)]$；
12. 如果还没有到光纤末端，则跳转到 5；
13. 停止。

所以有

$$A(z_0 + \Delta z, \omega) = \mathrm{e}^{\mathrm{j}\left(\frac{1}{2}\beta_2\omega^2 - \frac{1}{6}\beta_3\omega^3\right)\Delta z} A(z_0, \omega) \tag{9.41}$$

总结上述讨论，算法 9.1 可以计算光束波包函数的演进和沿着光纤的传播。

算法 9.1 的 MATLAB 代码如下。

```
% program calculates propagation of an optical pulse in a
% fibre using split step FFT method
clear % clears variables
clear global % clears global variables
format long e

% initial constants
i = sqrt(-1);% remember not to overwrite pi or i !
pi = 3.141592653589793e+000;

% fibre parameters
B2 = -1.00; % |beta2| [ps^2/km]
B3 = 0.0;% |beta3| [ps^3/km]
G = 2;% gamma [1/(W*km)]
P0 = 0.5;% pulse peak power [W]

% iput data
dz =.1; % z step [km]
NoSamp = 2^10;% number of samples
wind_width = 50;% numerical window width[ps]
dt = wind_width/NoSamp;

t_init = dt*(0:NoSamp-1);% t values
t = t_init-wind_width/2;
```

```
beam_width = 1.;% beam half width[ps]
E_init = sqrt(P0)./cosh(t/beam_width);% initial field

veka = (0:NoSamp/2);
vekb = ((-NoSamp/2+1):1:-1);
vekab = [veka vekb];% setting frequencies from 0:pi and -pi:~0
freq = vekab*2*pi/wind_width;% calculates the values of omega

E = E_init;
E = fft(E);
% main propagation loop
N_steps = 500;
for j = 1:N_steps
ffun = E.*(exp(i*B2*freq.^2*dz/4-i*B3*freq.^3*dz/12));
% dispersion half step
E1 = ifft(ffun);
E1 = E1.*exp(i*G*abs(E1).^2*dz); % nonlinear step
E = fft(E1).*(exp(i*B2*freq.^2*dz/4-i*B3*freq.^3*dz/12));
% dispersion half step
power(j) = sum(abs(ffun).^2);
end
```

与第2章的FFT法类似，SSFM同样反复计算FFT和反FFT。在上述代码中，与每步移动FFT频谱不同，我们计算采样点数量与频率的相关性，这样包含频率值的向量可以直接和包含样本FFT的向量相乘。图9.1画出了包含频率值的向量的形态。MATLAB代码执行SSFM，求解NSE的内容，可以参阅文献［2］的第4版。

图9.2所示为入纤功率分布，和单模光纤50km传送后的出纤功率分布。光纤参数β_2、β_3、γ分别为$0\text{ps}^2/\text{km}$，$0.1\text{ps}^3/\text{km}$，$2/(\text{W}\cdot\text{km})$。这些参数为工作在1.3μm附近波长的单模光纤的典型参数，与材料色散有关的β_2等于零。所以，色散的导数占主导，造成输出脉冲出现不对称。在仿真中设传播步长为0.1km，在时域设了2^{10}个采样点。初始脉冲幅度分布满足高斯分布：

$$A(z=0,t)=\sqrt{P_0}\mathrm{e}^{-\left(\frac{t}{2T_0}\right)^2}$$

式中，脉冲宽度$T_0=1\text{ps}$，$P_0=1\text{mW}$。

图9.3所示为基弧子在50km光纤中的传输。本例中，光纤参数β_2，β_3，γ分别为$-1\text{ps}^2/\text{km}$，$0\text{ps}^3/\text{km}$，$2/(\text{W}\cdot\text{km})$。这些参数为工作在1.55μm附近波长的单模光纤的典型参数。在仿真中设传播步长为0.1km，在时域设了2^{10}个采样点。初始脉冲幅度分布对应了基弧子：

$$A(z=0,t)=\frac{\sqrt{P_0}}{\cosh\left(\frac{t}{T_0}\right)}$$

式中，脉冲宽度$T_0=1\text{ps}$，$P_0=0.5\text{W}$。不考虑光纤损失时，脉冲形状不变。

与第2章的FFT算法相似，我们必须验证近似算法选择的计算窗口尺寸和采样率是否合适。不过，与第2章不同，算法9.1的结果与纵向步长有关，这是因为

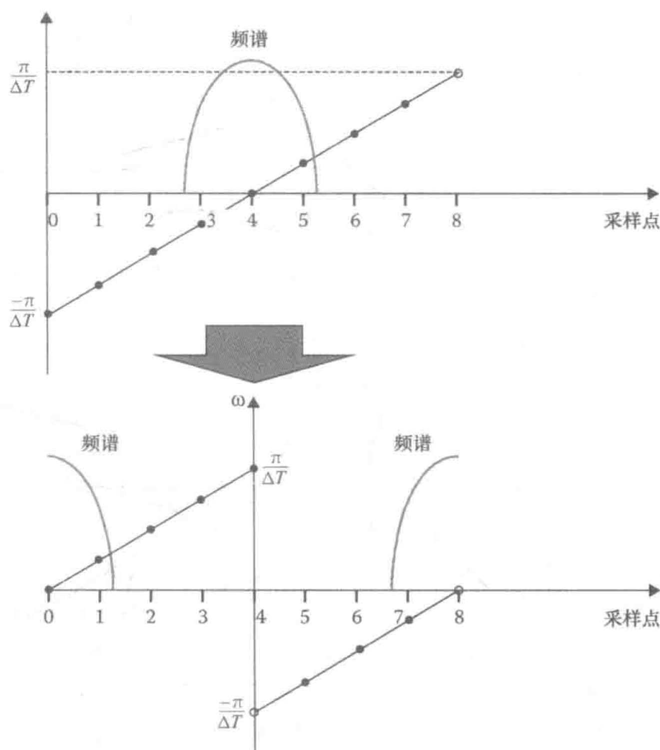


图 9.1　计算采样点和频率的相关性

（本例中，我们假设采样点总数等于 2^3）

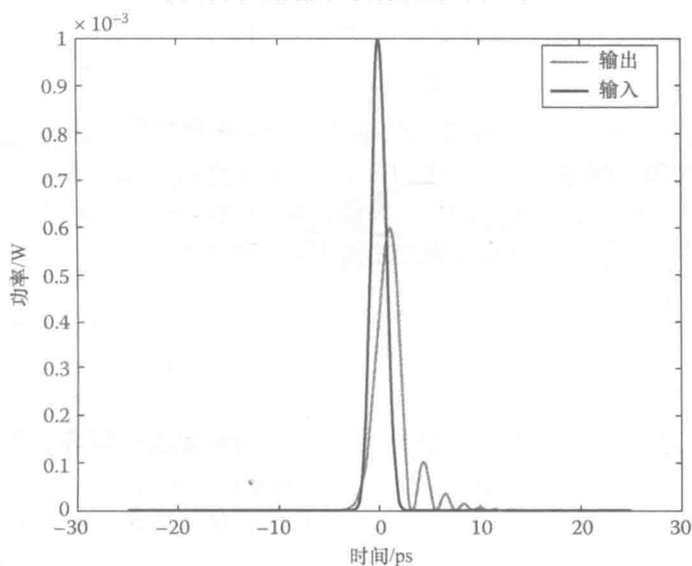


图 9.2　高斯脉冲在 50km 光纤中的传播。脉冲宽度为 1ps，峰值功率为 1mW。光纤参数 β_2，β_3，γ 分别为 $0\text{ps}^2/\text{km}$，$0.1\text{ps}^3/\text{km}$，$2/(\text{W}\cdot\text{km})$，在仿真中设传播步长为 0.1km，在时域设了 2^{10} 个采样点

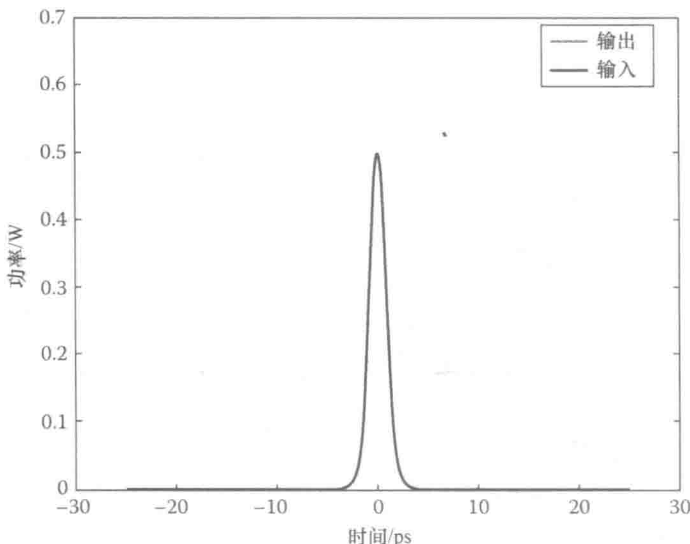


图 9.3　正割光脉冲在 50km 光纤中的传输

（脉冲宽度为 1ps，峰值功率为 1mW。光纤参数 β_2、β_3、γ 分别为 0ps²/km、0.1ps³/km、2/(W·km)，在仿真中设传播步长为 0.1km，在时域设了 2^{10} 个采样点）

方程（9.38）分离指数算子所致。减小纵向步长可以减小算法的误差，为了说明这一点，我们选择较长的纵向步长，重新计算图 9.3 的结果，步长 $\Delta z=1$。仿真结果如图 9.4 所示。输出脉冲形状发生了改变，这是因为指数算子分离误差带来的纯数值伪解造成的。有趣的是，用纵向波长等于 50km，也可以产生图 9.2 的结果。这是因为脉冲功率非常小，所以 $e^{N\Delta z}=1$，对任意纵向步长值，都可以和 $e^{D\frac{\Delta z}{2}}$ 交换。同样，当 $e^{D\frac{\Delta z}{2}}=1$ 时，SSFM 可以用一个纵向步长完成计算。

可变纵向步长可以提高 SSFM 的效率[12]。SSFM 可以用于研究四个光波在光纤中混合[13]和高阶非线性[2]。最新的 Runge - kutta 算法可以不需要进行算子分离，从而可以选择传播步长 Δz 更长[14]。当研究光纤的超连续发生时，需要考虑拉曼效应[3]。拉曼效应可以表示为三阶非线性[8]：

$$\vec{P}_{\mathrm{NL}}(\vec{r},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^{(3)}(\tau_1,\tau_2,\tau_3)\vec{E}(\vec{r},t-\tau_1)\vec{E}(\vec{r},t-\tau_2)\vec{E}(\vec{r},t-\tau_3)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3 \tag{9.42}$$

在文献［15］中，可以看到对拉曼效应，三阶敏感度可以表示为如下形式：

$$\chi^{(3)}(t_1,t_2,t_3)=\chi_{\mathrm{R}}(t_1)\delta(t_1-t_2)\delta(t_3) \tag{9.43}$$

式中，$\delta(t)$为狄拉克德尔塔分布。将方程（9.43）代入方程（9.42）可得

$$\vec{P}_{NL}(\vec{r},t)=\vec{E}(\vec{r},t)\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{\mathrm{R}}(\tau)\vec{E}(\vec{r},t-\tau)\vec{E}(\vec{r},t-\tau)\mathrm{d}\tau \tag{9.44}$$

对电场的 x 分量，$\chi_{\mathrm{R}}(t)$在硅玻璃种可以近似表示为如下形式：

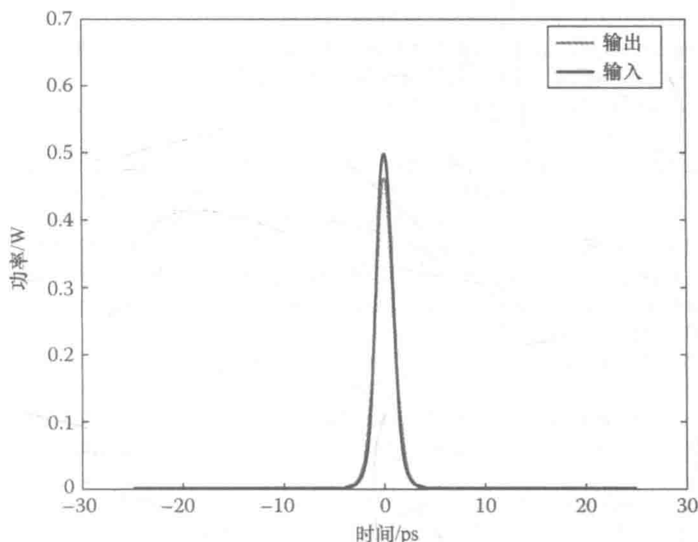


图 9.4　正割光脉冲在 50km 光纤中的传输

（脉冲宽度为 1ps，峰值功率为 0.5mW，光纤参数 β_2、β_3、γ 分别为 $-1\text{ps}^2/\text{km}$、$0\text{ps}^3/\text{km}$、$2/(\text{W}\cdot\text{km})$，在仿真中设传播步长为 0.1km，在时域设了 2^{10} 个采样点）

$$\chi_{\text{Rx}}(t)=\varepsilon_0\chi_{\text{xxxx}}^{(3)}\{(1-f_{\text{R}})\delta(t)+f_{\text{R}}h_{\text{R}}(t)\} \tag{9.45}$$

而 $h_{\text{R}}(t)$ 可以近似表示为如下函数[16]：

$$h_{\text{R}}(t)=1(t)(\tau_1^{-2}+\tau_2^{-2})\tau_1\exp(-t/\tau_2)\sin(t/\tau_1) \tag{9.46}$$

式中，$1(t)$ 为单位步长函数。有关硅玻璃光纤的拉曼增益谱建模更详细的内容，可以参阅文献［17，18］。

将方程（9.46）代入方程（9.8），可以得到归一化非线性薛定谔方程（GNSE）[2,3,19,20]。GNSE，进行适当的展开，可以用 SSFM 求数值解。这个算法的若干个版本可参阅文献［16.21］。为了提高效率，可以采用可变步长和最新 Runge - Kutta 算法，避免求解 GNSE 时进行算子分离[22,23]。SSFM 求解 GNSE 更详细的算法，以及 MATLAB 代码可参阅文献［24］。

参考文献

1. Schneider, T., *Nonlinear Optics in Telecommunications*. 2004, Heidelberg: Springer.
2. Agrawal, G., *Nonlinear Fibre Optics*. 2013, London: Academic Press.
3. Dudley, M.J. and J.R. Taylor, *Supercontinuum Generation in Optical Fibres*. 2010, Cambridge: Cambridge University Press.
4. Vasil'ev, P., *Ultrafast Diode Lasers*. 1995, London: Artech House.
5. Bloembergen, N., *Nonlinear Optics*. 1996, London: World Scientific Publishing.
6. Shen, Y.R., *The Principles of Nonlinear Optics*. 2003, New Jersey: Wiley-Interscience.
7. Boyd, R.W., *Nonlinear Optics*. 2008, San Diego: Elsevier.

8. Sauter, E.G., *Nonlinear Optics*. 1996, New York: Wiley.
9. Kivshar, Y.S. and G. Agrawal, *Optical Solitons*. 2003, London: Academic Press.
10. Trillo, S. and W. Torruellas, *Spatial Solitons*. 2001, Berlin: Springer.
11. Saleh, B.E.A. and M.C. Teich, *Fundamentals of Photonics*. 1991, New York: John Wiley & Sons Inc..
12. Sinkin, O.V., et al., Optimization of the split-step Fourier method in modeling optical-fiber communications systems. *Journal of Lightwave Technology* 2003. 21(1): p. 61–68.
13. Bosco, G., et al., Suppression of spurious tones induced by the split-step method in fiber systems simulation. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2000. 12(5): p. 489–491.
14. Zhang, Z., L. Chen, and X. Bao, A fourth-order Runge-Kutta in the interaction picture method for numerically solving the coupled nonlinear Schrodinger equation. *Optics Express*, 2010. 18(8): p. 8261–8276.
15. Zheltikov, A.M., The Raman effect in femto- and attosecond physics. *Physics-Uspekhi*, 2011. 54(1): p. 29–51.
16. Blow, K.J. and D. Wood, Theoretical description of transient stimulated Raman-scattering in optical fibers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1989. 25(12): p. 2665–2673.
17. Stolen, R.H., et al., Raman response function of silica-core fibers. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 1989. 6(6): p. 1159–1166.
18. Hollenbeck, D. and C.D. Cantrell, Multiple-vibrational-mode model for fiber-optic Raman gain spectrum and response function. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2002. 19(12): p. 2886–2892.
19. Laegsgaard, J., Mode profile dispersion in the generalized nonlinear Schrodinger equation. *Optics Express*, 2007. 15(24): p. 16110–16123.
20. Laegsgaard, J., Modeling of nonlinear propagation in fiber tapers. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, 2012. 29(11): p. 3183–3191.
21. Cristiani, I., et al., Dispersive wave generation by solitons in microstructured optical fibers. *Optics Express*, 2004. 12(1): p. 124–135.
22. Hult, J., A fourth-order Runge-Kutta in the interaction picture method for, simulating supercontinuum generation in optical fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2007. 25(12): p. 3770–3775.
23. Heidt, A.M., Efficient adaptive step size method for the simulation of supercontinuum generation in optical fibers. *Journal of Lightwave Technology*, 2009. 27(18): p. 3984–3991.
24. Travers, J.C., M.H. Frosz, and M.J. Dudley, Nonlinear fibre optics overview, In *Supercontinuum Generation in Optical Fibres*, M.J. Dudley and J.R. Taylor, Editors. 2010, Cambridge University Press: Cambridge.

国际视野　科技前沿

“本书的优势在于对基本方程式的详细讨论以及对数值方法的深入分析，作者明了地为读者带来了先进建模和实际设计现代器件的第一手经验。”

——Joachim Piprek 美国特拉华州纽瓦克NUSOD研究院

“本书体现了作者在光子学建模和仿真领域丰富的经验。本书内容推导严谨，观点深刻，简单易懂。”

—— Trevor Benson 英国诺丁汉大学

国际信息工程先进技术译丛

《光通信系统中的光子学建模与设计》
《云应用中的服务质量》
《ROF光载无线通信：从理论到前沿》
《全面详解LTE：MATLAB建模、仿真与实现》
《低速无线个域网：实现基于IEEE 802.15.4的无线传感器网络（原书第3版）》
《6LoWPAN：无线嵌入式物联网》
《虚拟网络——下一代互联网的多元化方法》
《Android系统安全与攻防》
《移动无线信道》（原书第2版）
《LTE-Advanced：面向IMT-Advanced的3GPP解决方案》
《认知无线电通信与组网：原理与应用》
《LTE/SAE网络部署实用指南》
《IP地址管理原理与实践》
《自组织网络：GSM，UMTS和LTE的自规划、自优化和自愈合》
《实现吉比特传输的60GHz无线通信技术》
《LTE自组织网络（SON）：高效的网络管理自动化》
《UMTS中的LTE：向LTE-Advanced演进》（原书第2版）
《UMTS中的WCDMA－HSPA演进及LTE》（原书第5版）
《UMTS中的LTE:基于OFDMA和SC-FDMA的无线接入》
《基于4G系统的移动服务技术》
《UMTS蜂窝系统的Q0S与Q0E管理》
《UMTS-HSDPA系统的TCP性能》
《基于射频工程的UMTS空中接口设计与网络运行》
《基于蜂窝系统的IMS—融合电信领域的V0IP演进》


机械工业出版社E视界


机械工业出版社微信公众号

上架指导 通信工程／光通信




CRC Press
Taylor & Francis Group

ISBN 978-7-111-53220-0　定价：99.00元

[General Information]
书名=光通信系统中的光子学建模与设计=Photonics modelling and design
作者=（波）斯瓦沃米尔?苏耶茨基著
页数=312
SS号=14032479
DX号=
出版日期=2016.05
出版社=机械工业出版社